

This Page Is Inserted by IFW Operations  
and is not a part of the Official Record

## **BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- 
- BLACK BORDERS
  - TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
  - FADED TEXT
  - ILLEGIBLE TEXT
  - SKEWED/SLANTED IMAGES
  - COLORED PHOTOS
  - BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
  - GRAY SCALE DOCUMENTS

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning documents *will not* correct images,  
please do not report the images to the  
Image Problem Mailbox.**

**THIS PAGE BLANK**

09/10/236  
PCT/JP97/03924

29.10.97

日 本 国 特 許 庁  
PATENT OFFICE  
JAPANESE GOVERNMENT

REC'D 06 FEB 1998

WIPO PCT

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日  
Date of Application:

1996年11月11日

出 願 番 号  
Application Number:

平成 8年特許願第299073号

出 願 人  
Applicant (s):

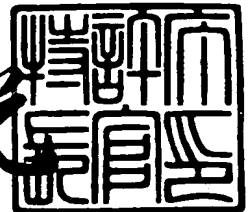
住友化学工業株式会社

PRIORITY DOCUMENT

1998年 1月23日

特許庁長官  
Commissioner,  
Patent Office

荒井寿光



出証番号 出証特平09-3100177

【書類名】 特許願

【整理番号】 147549

【提出日】 平成 8年11月11日

【あて先】 特許庁長官 荒井 寿光 殿

【国際特許分類】 G01N 9/00

【発明の名称】 有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法

【請求項の数】 5

【発明者】

【住所又は居所】 兵庫県宝塚市高司4丁目2番1号 住友化学工業株式会社内

【氏名】 的場 好英

【発明者】

【住所又は居所】 大阪府大阪市此花区春日出中3丁目1番98号 住友化学工業株式会社内

【氏名】 松尾 昌▲とし▼

【特許出願人】

【識別番号】 000002093

【氏名又は名称】 住友化学工業株式会社

【代表者】 香西 昭夫

【代理人】

【識別番号】 100080034

【弁理士】

【氏名又は名称】 原 謙三

【電話番号】 06-351-4384

【手数料の表示】

【予納台帳番号】 003229

【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【包括委任状番号】 9006416

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法

【特許請求の範囲】

【請求項1】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を残留噴霧するときに、噴霧箇所と、大きさに応じて2種に分けた浮遊粒子と、室内全体の空気と、床と、壁と、天井とにおける上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって、上記化合物の室内挙動を予測することを特徴とする有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法。

【請求項2】

上記連立微分方程式を解くときに、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、残留噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することを特徴とする請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法。

【請求項3】

上記床の種類が繊維の穂立ちを有する敷物の場合には、上記連立微分方程式に上記敷物の条件に基づく微分方程式を加えることを特徴とする請求項1又は2に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法。

【請求項4】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を残留噴霧するときに、噴霧箇所と、大きさに応じて2種に分けた浮遊粒子と、室内全体の空気と、床と、壁と、天井とにおける上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって、上記化合物の室内挙動を予測し、その後、上記予測結果に基づいて上記溶液を残留噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価することを特徴とする有害生物防除活性化合物の安全性評価方法。

【請求項5】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を残留噴霧するときに、噴霧箇所と、大きさに応じて2種に分けた浮遊粒子と、室内全体の空気と、床と、壁と、天井とに

における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって、上記化合物の室内挙動を予測するコンピュータプログラムを記録した記録媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、有害生物防除活性化合物が含まれる薬剤を残留噴霧した際の化合物の室内挙動を予測する有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法、及びそれを用いて人体に対する安全性を評価する安全性評価方法に関するものである。

【0002】

【従来の技術】

従来から、地球環境における化学物質の振る舞いをシュミレートするFugacityモデルが知られている。上記Fugacityモデルは、化学物質がある媒体から他の媒体へ逃げようとする外力、即ち圧力を単位に持つFugacityを利用するものである。例えば化学物質濃度が2つの媒体A、Bで異なっているときに、各媒体における濃度は、

$$N_A / V_A = f_A Z_A$$

$$N_B / V_B = f_B Z_B$$

で表される。ここで、Nは化学的質量、Vは媒体の体積、fはFugacity、及びZは媒体のFugacity capacityである。

【0003】

このとき、媒体A、B間の化学物質の移動(Transference)及び分解(Degradation)によって質量Nは時間と共に変化する一方、体積V及びFugacity capacity Zを一定と仮定したとき、上記2式は、

$$\begin{aligned} (df_A / dt) V_A Z_A &= dN_A / dt \\ &= -(\text{Degradation})_A \pm (\text{Transference})_{AB} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (df_B / dt) V_B Z_B &= dN_B / dt \\ &= -(\text{Degradation})_B \pm (\text{Transference})_{AB} \end{aligned}$$

と表される。

【0004】

この2つの微分方程式におけるDegradationとTransferenceとが与えられれば、未知のパラメータである $f_A$ 、 $f_B$ を計算で求めることができ、これらにFugacity capacity  $Z_A$ 、 $Z_B$ を各々掛けることによって、各媒体における特定期間の化学物質濃度をシュミレートすることが可能となる。

【0005】

その他、特開昭64-88811号公報には、炭酸ガス等の特定ガス成分の温度変化を評価する場合に、実際に閉鎖空間を構成することなく、どんな容量の閉鎖空間にも対応してシュミレーションを行うことが可能な閉鎖空間疑似試験装置の構成が開示されている。

【0006】

また、有害物質の人体に対する影響を評価する構成としては、以下に示すものが従来からある。

【0007】

例えば、特開平3-89146号公報には、平行型セルよりも臨床状態に近い系である垂直型拡散セルを用いることによって、皮膚上の基剤からの薬剤の放出過程を光音響測定で、また、薬剤の皮膚浸透過程を吸光度法にて、同時にリアルタイムで測定することが可能な経皮吸収評価装置の構成が開示されている。

【0008】

さらに、特開平7-218496号公報には、化学物質に固有に存在する溶解パラメータと上記化学物質の哺乳動物に対する半数致死量の対数値とが特定の相関関係にあることを用いて、化学物質の哺乳動物に対する急性毒性を予測するシステムの構成が開示されている。

【0009】

【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、床と壁との境に殺虫剤を噴霧し、残留した殺虫剤によって例えばゴキブリ等の害虫を駆除する残留噴霧（本発明の説明図である図2参照）を行った場合、噴霧した殺虫剤中の有害生物防除活性化合物がどのような振る舞いを示すかを予測する方法は従来にはなかった。



【0010】

また、上記のように残留噴霧を行った場合の有害生物防除活性化合物の挙動を予測する方法がなかったため、この場合に有害生物防除活性化合物が人体に対してどのような影響を及ぼすかを評価する安全性評価方法も確立されたものはなかった。

【0011】

本発明は、上記従来の問題点を解決するためになされたもので、その目的は、環境を7種の媒体に分類し、各媒体における有害生物防除活性化合物の圧力に関する微分方程式を連立することによって、残留噴霧した場合の化合物の振る舞いを予測することが可能な有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法を提供することにある。

【0012】

【課題を解決するための手段】

上記の目的を達成するために、本発明の請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、有害生物防除活性化合物を含む溶液を残留噴霧するときに、噴霧箇所と、大きさに応じて2種に分けた浮遊粒子と、室内全体の空気と、床と、壁と、天井とにおける上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって上記化合物の室内挙動を予測することを特徴としている。

【0013】

上記の方法によれば、室内環境を7種の媒体に分類し、各媒体における化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって、有害生物防除活性化合物の室内での振る舞いを予測する。このとき、環境を残留噴霧に適した7種の媒体に分けているので、実際の化合物の挙動に近いシュミレーション結果を得ることが可能となる。

【0014】

請求項2に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、請求項1に記載の方法に加えて、上記連立微分方程式を解くときに、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、残留噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することを特徴とし

ている。

【0015】

上記の方法によれば、上記連立微分方程式を解くときに、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように揮散後の室内での化合物のマスバランスが常にチェックされて微小時間単位が可変するので、マスバランスの変動が小さい場合には上記微小時間単位が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると微小時間単位が小さく設定されることとなる。つまり、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定される。

【0016】

これにより、微小時間単位が一定値の場合と比べて、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

【0017】

請求項3に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、請求項1又は2に記載の方法に加えて、上記床（特に噴霧箇所）の種類が繊維の穂立ちを有する敷物の場合には、上記連立微分方程式に上記敷物の条件に基づく微分方程式を加えることを特徴としている。

【0018】

上記の方法によれば、床の種類が繊維の穂立ちを有する敷物の場合には、繊維の穂立ち間の空間部分に溶液が溜まることから、平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なるので、請求項1の連立微分方程式に加えて、敷物における化合物の圧力に関する微分方程式を立てている。これにより、床上に繊維の穂立ちを有する敷物を敷いている場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシュミレーションが行える。

【0019】

請求項4に記載の有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、請求項1に記載の室内挙動予測方法の予測結果に基づいて、上記溶液を残留噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価することを特徴としている。

【0020】

上記の方法によれば、請求項1に記載の方法で得られた予測結果を用いているので、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、有害生物防除活性化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

【0021】

尚、請求項5に記載したように、有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法をコンピュータプログラムとして実現することもできる。

【0022】

【発明の実施の形態】

〔実施の形態1〕

本発明の第1の実施形態について図1ないし図5に基づいて説明すれば、以下の通りである。

【0023】

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤（溶液）に含まれる有害生物防除活性化合物（以下、単に化合物と称する）の室内挙動予測方法では、例えばゴキブリ等の室内の害虫を駆除するために薬剤を残留噴霧した場合の化合物の振る舞いを予測するものである。ここで、残留噴霧とは、床と壁との境等という局所的な部位に、薬剤を噴霧する処理法のことを言う。尚、上記薬剤は、ピレスロイド系殺虫性化合物、有機リン系化合物、カーバメイト系化合物、及び昆虫成長抑制剤（IGR）を含むすべての殺虫剤等である。

【0024】

まず、環境を、図2に示すように、噴霧箇所1、大粒子（浮遊粒子）2、小粒子（浮遊粒子）3、室内全体の空気4、床5、壁6、及び天井7の7種の媒体に分類する。

【0025】

床5と壁6との境に薬剤を噴霧すると、噴霧箇所1に薬剤が付着すると共に、残りは空気中に大・小粒子2・3として飛散する。上記噴霧箇所1に付着した薬

剤はその箇所に浸透するだけでなく、蒸発する。一方、大・小粒子2・3については、その重さのため大粒子2よりも小粒子3の方が上方に飛散し、これらの粒子が床5・壁6・天井7の内装材上に付着したとき、粒子中の化合物は内装材にしみ込んだ後空気4中に移動するか、もしくは光・酸化によって分解する。このような大・小粒子2・3や蒸発した薬剤は部屋の換気によって減少している。

# 【0026】

上記7種の媒体における化合物のFugacityに関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタ法を用いて解くことによって、薬剤を残留噴霧した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布、及び噴霧箇所1、床5、壁6、あるいは天井7への付着量の経時的変化を予測解析する。

# 【0027】

このとき、床5の種類としては、主に畳、フローリング、及びカーペット（敷物）の3種があるので、床種類に応じた微分方程式を立てることとする。本実施形態では、床5をフローリングとした場合について説明する。

# 【0028】

図1に基づいて、上記化合物の室内挙動予測方法を説明する。

まず、ステップ（以下、Sと略称する）1で1次条件を入力する。この1次条件は、化合物の物理化学的性質（表1参照）、化合物の室内環境挙動性質（表2参照）、室内環境（表3参照）、及び製品の性質（表4参照）である。

# 【0029】

【表1】

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	—	350.46 [g/mole]
比重	$\rho$	1.11 [g/cm <sup>3</sup> ]
蒸気圧	P <sup>s</sup>	1.60 × 10 <sup>-4</sup> [Pa]
水溶解度	C <sup>s</sup>	6.28 × 10 <sup>-3</sup> [mole/m <sup>3</sup> ]
オクタノール／水分配係数	K <sub>ow</sub>	7.59 × 10 <sup>4</sup>

【0030】

【表2】

化合物の室内 環境挙動性質	記号	数値例
分解半減期 in 噴霧箇所	$\tau_1$	13 [day]
粒子	$\tau_i$ (i=2, 3)	7.7 [h]
空気	$\tau_4$	7.7 [h]
床	$\tau_5$	13 [day] (フローリングの場合)
壁・天井	$\tau_j$ (j=6, 7)	31 [day] (壁紙の場合)

【0031】

【表3】

室内環境		記号	数値例
オイル ベ ー ス	部屋の大きさ	$V_L$	23.3 [m <sup>3</sup> ]
	温度	T	298 [K] (= 25[°C])
	相対湿度	$\phi$	60 [%RH]
	絶対湿度	H	1.19 × 10 <sup>-2</sup> [kg-H <sub>2</sub> O/kg-dry air]
	換気率	G	1.58 [1/h]
	粒子構成溶媒の室内蒸気圧	$P_\infty$	0 [Pa]
	空気拡散係数	$D_{air}$	8.64 × 10 <sup>-2</sup> [m <sup>2</sup> /h]
	粒子構成溶媒成分含有率	—	0.04 (フローリングの場合) 0.46 (畳の場合) 0.3 (壁紙の場合)
水   ベス	湿球温度	$T_d$	292.5 [K]
	水の蒸気圧	$P_\infty$	1.89 × 10 <sup>3</sup> [Pa]

但し、 $V_L = L_L \times W_L \times \text{高さ}$  (=3.6m×2.7m×2.4m) である。

【0032】

【表4】

製品の性質		記号	数値例
オイルベース	化合物含有量	$C_a$	$6.74 \times 10^3 \text{ [g/m}^3 \text{]}$
	化合物放出量	$A_a$	$8.19 \times 10^{-4} \text{ [mole]}$
	粒子構成溶媒放出量	$O_a$	$4.26 \times 10^{-5} \text{ [m}^3 \text{]}$
	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	$P_d$	2.72 [Pa]
	分子量	$M_d$	184.37 [g/mole]
	比重	$\rho_d$	$7.56 \times 10^{-6} \text{ [g/m}^3 \text{]}$
	噴霧箇所への付着割合	—	60 [%]
	浮遊粒子の直径（2種）	$d_{02}$	20 [ $\mu\text{m}$ ]
		$d_{03}$	5 [ $\mu\text{m}$ ]
	浮遊粒子の分布（2種）	—	30 [%] （大粒子）
水ベース		—	10 [%] （小粒子）
	噴霧箇所の面積	$A_t$	$(3.6+2.7) \times 0.1 \times 4$ [ $\text{m}^2$ ]
	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	$P_d$	$2.26 \times 10^3 \text{ [Pa]}$
	分子量	$M_d$	18 [g/mole]
	比重	$\rho_d$	$1 \times 10^6 \text{ [g/m}^3 \text{]}$

【0033】

次に、上記1次条件を用いて2次条件を計算で求める（S2）。この2次条件には、1次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件（表5参照）と、時間的な変化を伴う経時的変化条件（表6参照）とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。

【0034】

【表5】

一義的要因条件	記号
浮遊粒子の蒸発定数	$\alpha$
製品中の化合物の体積割合	$R_a$
空気中の化合物の拡散係数	$D_{ca}$
床・壁・天井の表面積	$A_j$ ( $j=5, 6, 7$ )
床・壁・天井の拡散係数	$D_c$
浮遊粒子が噴霧箇所へ落下する割合	$R_1$
浮遊粒子が床・壁・天井に付着する割合	$R_j$ ( $j=5, 6, 7$ )
Fugacity capacity	
○ f 噴霧箇所	$Z_1$
浮遊粒子	$Z_i$ ( $i=2, 3$ )
空気	$Z_4$
床・壁・天井	$Z_j$ ( $j=5, 6, 7$ )
分解定数 ○ f 噴霧箇所	$K_1$
浮遊粒子	$K_i$ ( $i=2, 3$ )
空気	$K_4$
床	$K_5$
壁・天井	$K_j$ ( $j=6, 7$ )

ここで、表1の数値例に基づく拡散係数の数値例は  
 $1.36 \times 10^{-11}$  [ $m^2/h$ ] である。

【0035】

【表6】

経時的变化条件	記号
浮遊粒子の直径 落下速度 浮遊数 浮遊高さ	$d_i$ ( $i=2, 3$ ) $v_i$ ( $i=2, 3$ ) $n_i$ ( $i=2, 3$ ) $H_i$ ( $i=2, 3$ )
化合物の移動速度 i n 噴霧箇所 浮遊粒子 空気 床・天井・壁	$k_1$ $k_i$ ( $i=2, 3$ ) $k_4$ $k_j$ ( $j=5, 6, 7$ )
噴霧箇所と空気との間の 化合物の移動係数 浮遊粒子と空気との間の 化合物の移動係数 空気と床・壁・天井との間の 化合物の移動係数	$D_{14}$ $D_{i4}$ ( $i=2, 3$ ) $D_{4j}$ ( $j=5, 6, 7$ )
噴霧箇所の体積 浮遊粒子の体積 床・壁・天井の体積	$V_1$ $V_i$ ( $i=2, 3$ ) $V_j$ ( $j=5, 6, 7$ )

【0036】

上記2次条件を用いて7種のFugacityを計算する(S3)。即ち、噴霧箇所1、大・小粒子2・3、空気4、床5、壁6、及び天井7に関する7種の微分方程式を連立し、これをルンゲクッタ法で解き、7種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単



位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

【0037】

S4で、上記算出された小粒子3及び空気4のFugacity ( $f_3$ ,  $f_4$ )、必要に応じて大粒子2のFugacity ( $f_2$ )を用いて化合物の経時的室内空气中濃度を算出し、噴霧箇所1及び床5のFugacity ( $f_1$ ,  $f_5$ )を用いて化合物の噴霧箇所1及び床5への経時的な残留量を算出する。

【0038】

S5で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する(S6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する(S7)。S8で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S8で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S1へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の1次条件の変更を検討する。

【0039】

また、上記S5で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した噴霧箇所1や床5に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する(S9)。その後、S10で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する(S11)。S12で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S12で安全性に問題がある場合にはS1に戻って1次条件の変更を検討する。

【0040】

また、上記S10で経皮における安全性評価でない場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程度曝露さ

れるかを示す経口推定曝露量を計算し（S13）、続いて、この経口推定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する（S14）。この経口曝露は、特に幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S15で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S15で安全性に問題がある場合にはS1に戻って1次条件の変更を検討する。

【0041】

最後に、S8、S12、あるいはS15において、安全であると判断された場合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることにより、総合安全係数を求める（S16）。この総合安全係数を基準値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う（S17）。

【0042】

次に、上記S2～S4、S6、S7、S9、S11、S13、及びS14の工程について詳細に説明する。

【0043】

(1) 2次条件計算（S2）

上記表5に示した一義的要因条件、及び表6に示した経時的変化条件の計算を説明する。

【0044】

大・小粒子2・3の蒸発定数（ $\alpha$ ）は、粒子の表面温度（ $T_d$ ）、粒子構成溶媒の性質（蒸気圧 $P_d$ 、分子量 $M_d$ 、比重 $\rho_d$ ）、及び室内環境（空気拡散係数 $D_{air}$ 、蒸気圧 $P_\infty$ 、室温 $T$ ）より、以下のように定義される。但し、 $R$ は気体定数である。

【0045】

【数1】

$$\alpha = \frac{4D_{air} M_d}{R \rho_d} \left( \frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T_\infty} \right) \quad \text{----(1)}$$

【0046】

尚、前記表3及び表4の上部は残留噴霧エアゾールがオイルベースの場合を例示し、この場合には $T_{\infty}$ （粒子から遠く離れた箇所の温度）や $T_d$ は室温（ $T$ ）とし、 $P_{\infty}$ （粒子から遠く離れた箇所のオイルの蒸気圧）はゼロとする。

【0047】

また、残留噴霧エアゾールが水ベースの場合には、式（1）の $P_d$ 、 $M_d$ 、 $\rho_d$ 、 $T_d$ 、及び $P_{\infty}$ は水の性質に基づく値に変更する必要がある。具体的には、室温（ $T$ ）が298 [K]（=25℃）、相対湿度が60 [%RH]時の上記要因値を表3及び表4の下部に例示している。

【0048】

尚、 $T_d$ は室温（ $T$ ）及び絶対湿度（ $H$ ）に基づき、化学機械の理論と計算（第2版）（亀井三郎編、産業図書）等に記載される「質量基準湿度表」から求めることができる。また、 $P_d$ と $P_{\infty}$ は、以下の式より算出可能である。

【0049】

$$\log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$\log_{10} P_{\infty} = 8.23 - 1750 / (T - 38) + \log_{10} \phi$$

ここで、 $\phi$ は室内の相対湿度である。

【0050】

噴霧箇所1のFugacity capacity（ $Z_1$ ）は、化合物の蒸気圧（ $P^S$ ）、水溶解度（ $C^S$ ）、及びオクタノール／水分配係数（ $K_{ow}$ ）より、

【0051】

【数2】

$$Z_1 = K_{ow} C^S / P^S \quad \text{---(2)}$$

【0052】

と表される。このとき、式（2）に、フローリング中の粒子構成溶媒成分含有率及び壁紙中の粒子構成溶媒成分含有率を面積比率に応じて乗じることとする。

【0053】

大・小粒子2・3のFugacity capacity（ $Z_i, i=2,3$ ）は、化合物の蒸気圧（

$P^S$  )、及び粒子の表面温度 ( $T_d$ ) より、

【0054】

【数3】

$$Z_i = \frac{6 \times 10^6}{P_L^S R T_d} \quad \text{----(3)}$$

$$P_L^S = P^S \exp \left\{ 6.79 (T_M/T_d - 1) \right\}$$

【0055】

と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧 ( $P_L^S$ ) を  $T_M$  と  $T_d$  を用いて算出しているが、 $T_M$  が得られない場合、 $P_L^S$  は固体状態の化合物の蒸気圧 ( $P^S$ ) と同じとしてよい。

【0056】

空気4のFugacity capacity ( $Z_4$ ) は、室温 ( $T$ ) より、次のように表される。

【0057】

【数4】

$$Z_4 = \frac{1}{RT} \quad \text{----(4)}$$

【0058】

床5、壁6、及び天井7のFugacity capacity ( $Z_j$ ,  $j=5,6,7$ ) は、化合物の蒸気圧 ( $P^S$ )、水溶解度 ( $C^S$ )、及びオクタノール/水分配係数 ( $K_{ow}$ ) より、

【0059】

【数5】

$$Z_j = K_{ow} C^S / P^S \quad \text{----(5)}$$

【0060】

と表される。ここで、式(5)にフローリング中の粒子構成溶媒成分含有率を乗じることによって床5のFugacity capacity ( $Z_5$ ) が求められ、式(5)に壁

紙中の粒子構成溶媒成分含有率を乗じることによって壁6及び天井7のFugacity capacity ( $Z_6$ ,  $Z_7$ ) が求められる。

【0061】

大・小粒子2・3が床5・壁6・天井7に付着する割合( $R_j$ )は、安全性評価の観点から床5に100%付着するとしてもよいが、過去の実測値から、例えば、床:壁:天井=97:2:1にしてもよい。

【0062】

大・小粒子2・3が噴霧箇所1に落下する割合( $R_1$ )は、上記割合( $R_j$ )、及び部屋の大きさ( $V_4$ )に対する噴霧箇所1の占有面積( $A_1$ )より求まる。

【0063】

床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数( $D_c$ )は、以下のようにして算出可能である。即ち、 $D_c$ は空気中の化合物の拡散係数( $D_{ca}$ )に $10^{-9}$ を乗じて求めることが可能であり、 $D_{ca}$ は化合物の性質(構造式、分子量等)から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, 1982)に従って、算出可能である。

【0064】

7種の媒体中では主に光・酸化分解反応が生じており、噴霧箇所1の分解定数( $K_1$ )、大・小粒子2・3の分解定数( $K_i$ ,  $i=2,3$ )、空気4の分解定数( $K_4$ )、床5の分解定数( $K_5$ )、及び壁6・天井7の分解定数( $K_j$ ,  $j=6,7$ )は、分解半減期( $\tau_1$ )、( $\tau_i$ )、( $\tau_4$ )、( $\tau_5$ )、あるいは( $\tau_j$ )を用いて、

【0065】

【数6】

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= 0.693 / \tau_1 \\ K_i &= 0.693 / \tau_i \\ K_4 &= 0.693 / \tau_4 \\ K_5 &= 0.693 / \tau_5 \\ K_j &= 0.693 / \tau_j \end{aligned} \right\} \text{----(6)}$$

【0066】

と定義される。このとき、前記表2に示すような分解半減期の内、空気中の化合物の分解半減期 ( $\tau_4$ ) は実測が難しいので、分解定数 ( $K_4$ ) を決定するのは容易でないことが多い。そこで、実測値が入手できない場合、化合物の構造式を用いて、Atomospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol.84, pp437-470) で算出し求める方法もある。また、粒子中並びに内装材 (床5・壁6・天井7) 中の分解定数については、実測値が入手できない場合、居住者の安全性を見込みゼロとすることも可能である。

【0067】

時間  $t$  での大・小粒子2・3の直径 ( $d_i, i=2,3$ ) は、粒子の体積が粒子構成溶媒成分の蒸発により時間と共に小さくなるので、粒子構成溶媒成分が蒸発している間については、噴霧直後 ( $t=0$ ) の粒子の直径 ( $d_{0i}, i=2,3$ )、及び式(1)より求まる蒸発定数 ( $\alpha$ ) を用いて、以下の式(7)の通りとなる。

【0068】

【数7】

$$d_i = \sqrt{d_{0i}^2 - 2\alpha t} \quad \text{----(7)}$$

$$d_i = \sqrt[3]{R_a} d_{0i} \quad \text{----(7')}$$

【0069】

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の直径 ( $d_i$ ) は、製品中

の化合物の体積割合 ( $R_a$ ) と噴霧直後の粒子の直径 ( $d_{0i}$ ) とを用いて、上記の式 (7') の通りとなる。

【0070】

製品中の化合物の体積割合 ( $R_a$ ) は、化合物含有量 ( $C_a$ ) 及び化合物の比重 ( $\rho$ ) より、 $C_a / \rho$  として表される。

【0071】

粒子構成溶媒成分が蒸発し終わるまでの大・小粒子 2・3 の落下速度 ( $v_i$ ,  $i=2,3$ ) は、粒子の動きが重力と空気抵抗に支配されているので、粒子構成溶媒の比重 ( $\rho_d$ )、及び式 (7) より求まる粒子の直径 ( $d_i$ ) を用いて、ストークスの法則より以下の式 (8) となる。

【0072】

【数8】

$$v_i = \frac{\rho_d g S_c}{18\eta} d_i^2 = \beta (d_{0i}^2 - 2\alpha t) \quad \text{----(8)}$$

$$S_c = 1 + \frac{2}{7.6 \times 10^7 d_i} \left\{ 6.32 + 2.01 \exp(-8.322 \times 10^6 d_i) \right\} \quad \text{----(8')}$$

$$v_i = (\rho / \rho_d) \beta d_i^2 \quad \text{----(8'')}$$

【0073】

但し、 $g$  は重力加速度、 $\eta$  は空気 4 の粘性率、 $S_c$  はすべり補正係数、及び  $\beta$  は速度係数である。ここで、すべり補正係数 ( $S_c$ ) は、粒子が小さくなるとストークスの法則に従わなくなるので、これを補正するための係数であり、式 (7) より求まる粒子の直径 ( $d_i$ ) により上記の式 (8') で示される。

【0074】

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の落下速度 ( $v_i$ ) は、化合物の比重 ( $\rho$ )、粒子構成溶媒の比重 ( $\rho_d$ )、速度係数 ( $\beta$ )、及び式 (7') より求まる粒子の直径 ( $d_i$ ) により、上記に示す式 (8'') と表される。

【0075】

大・小粒子 2・3 の浮遊数 ( $n_i$ ,  $i=2,3$ ) は、後述の空気 4 中の化合物の移動

速度 ( $k_4$ )、粒子の浮遊高さ ( $H_i$ )、部屋の大きさ ( $V_4 = L_4 \times W_4 \times$  高さ)、及び式 (8) あるいは式 (8") で求まる粒子の落下速度 ( $v_i$ ) より、

【0076】

【数9】

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{H_i} v_i - \frac{n_i}{L_4} k_4 \quad \text{----(9)}$$

【0077】

と表される。ここで、粒子の浮遊高さ ( $H_i$ ) は、薬剤を噴霧箇所1に噴霧したときに噴霧箇所1で反射し浮遊した後の粒子分布の床5からの最高高さを意味し、粒子が細かいほど高い所に位置することになる。

【0078】

噴霧箇所1中の化合物の移動速度 ( $k_1$ ) は、床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数 ( $D_c$ ) を用いて、 $(D_c / t)^{0.5}$  と表される。

【0079】

大・小粒子2・3中の化合物の移動速度 ( $k_i, i=2,3$ ) は、次に示す空気4中の化合物の移動速度 ( $k_4$ ) より、 $k_4 / 100$  として表される。

【0080】

空気4中の化合物の移動速度 ( $k_4$ ) は、換気率 ( $G$ ) より、 $GV_4 / A_4$  として示される。ここで、上記  $A_4$  は、空気4の移動方向 (図2中の矢印方向) に対する部屋の断面積のことである。

【0081】

床5・壁6・天井7中の化合物の移動速度 ( $k_j, j=5,6,7$ ) は、床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数 ( $D_c$ ) を用いて  $(D_c / t)^{0.5}$  と表される。

【0082】

噴霧箇所1と空気4との間の化合物の移動係数 ( $D_{14}$ ) は、噴霧箇所1中の化合物の移動係数 ( $k_1$ )、空気4中の化合物の移動速度 ( $k_4$ )、噴霧箇所1の面積 ( $A_t$ )、式 (8) または (8") により求まる粒子の落下速度 ( $v_i$ )、式 (2) より求まる噴霧箇所1のFugacity capacity ( $Z_1$ )、及び式 (4) より求まる空気4のFugacity capacity ( $Z_4$ ) より、以下のようになる。



【0083】

【数10】

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_1 A_1 A_t Z_1) + 1/\{(k_4 + v_i) A_1 A_t Z_4\}} \quad \text{----(10)}$$

【0084】

大・小粒子2・3と空気4との間の化合物の移動係数 ( $D_{i4}, i=2,3$ ) は、大・小粒子2・3中の化合物の移動速度 ( $k_i$ )、空気4中の化合物の移動速度 ( $k_4$ )、式(7)あるいは式(7')より求まる粒子の直径 ( $d_i$ )、式(3)で求まる粒子のFugacity capacity ( $Z_i$ )、及び式(4)より求まる空気4のFugacity capacity ( $Z_4$ )より、次のようになる。ここで、 $A_i (= \pi d_i^2)$  は粒子の表面積である。

【0085】

【数11】

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/(k_4 A_i Z_4)} \quad \text{----(11)}$$

【0086】

空気4と、床5・壁6・天井7と間の化合物の移動係数 ( $D_{4j}, j=5,6,7$ ) は、空気4中の化合物の移動速度 ( $k_4$ )、床5・壁6・天井7中の化合物の移動速度 ( $k_j$ )、床5・壁6・天井7の表面積 ( $A_j$ )、式(4)より求まる空気4のFugacity capacity ( $Z_4$ )、及び式(5)より求まる床5・壁6・天井7のFugacity capacity ( $Z_j$ )より、

【0087】

【数12】

$$D_{4j} = \frac{1}{1/(k_4 A_j Z_4) + 1/(k_j A_j Z_j)} \quad \text{----(12)}$$

【0088】

となる。尚、床5、壁6、及び天井7の表面積 ( $A_j$ ) は、それぞれ部屋の大きさ ( $V_4 = L_4 \times W_4 \times \text{高さ}$ ) と噴霧箇所1の面積 ( $A_t$ ) より求められる。

【0089】

噴霧箇所1の体積 ( $V_1$ ) は、床5・壁6・天井7中の拡散係数 ( $D_c$ ) より求まる。

【0090】

大・小粒子2・3の体積変化 ( $dV_i / dt$ ) は、式(7)あるいは式(7')より求まる浮遊粒子の直径 ( $d_i$ )、及び式(1)より求まる蒸発定数 ( $\alpha$ )を用いて、

【0091】

【数13】

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{\pi}{2} \alpha d_i \quad \text{----(13)}$$

【0092】

と表される。つまり、大・小粒子2・3は、粒子中のオイル成分あるいは水分が時間と共に蒸発して、その体積 ( $V_i$ ,  $i=2,3$ ) が減少する。

【0093】

床5・壁6・天井7の体積 ( $V_j$ ,  $j=5,6,7$ ) は、薬剤が残留噴霧される前の床5、壁6、及び天井7をそれぞれ薄い膜状のものと考え、薬剤がそれらの膜にしみ込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考え、上記床5・壁6・天井7の表面積 ( $A_j$ )、及び床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数 ( $D_c$ ) より、次のように示される。

【0094】

【数14】

$$V_j = 2\sqrt{D_c t} A_j \quad \text{----(14)}$$

【0095】

(2) Fugacity計算 (S3)

噴霧箇所1での化合物の振る舞いは、Fugacity ( $f_1$ ) に関する微分方程式として、

【0096】

【数15】

$$\begin{aligned}
 \frac{df_1}{dt} V_1 Z_1 &= -\sqrt{D_c/t} A_t Z_1 f_1 && \text{V-change} \\
 &+ \sum_{i=2}^3 R_1 n_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition (i)} \\
 &- D_{14} (f_1 - f_4) && \text{Transference (1)} \\
 &- K_1 V_1 Z_1 f_1 && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

----(15)

【0097】

と表される。ここで、V-changeの項は噴霧箇所1の体積変化（時間と共に増加）を、Deposition(i)の項は大・小粒子2・3の落下に伴う付着を、Transference(1)の項は噴霧箇所1と空気4との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

【0098】

大・小粒子2・3中の化合物の振る舞いは、Fugacity ( $f_i$ ,  $i=2,3$ )に関する微分方程式として、

【0099】

【数16】

$$\begin{aligned}
 \frac{df_i}{dt} V_i Z_i &= \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i && \text{V-change} \\
 &- D_{14} (f_1 - f_4) && \text{Transference (1)} \\
 &- D_{i4} (f_i - f_4) && \text{Transference (4)} \\
 &- K_i V_i Z_i f_i && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

----(16)

【0100】

と表される。ここで、V-changeの項は大・小粒子2・3の体積変化（時間と共に減少）を、Transference(1)の項は噴霧箇所1と空気4との間の化合物の移動量を、Transference(4)の項は大・小粒子2・3と空気4との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を各々表している。

【0101】

空気4中の化合物の振る舞いは、Fugacity ( $f_4$ ) に関する微分方程式として

【0102】

【数17】

$$\begin{aligned} \frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 = & -GV_4 Z_4 f_4 && \text{Ventilation} \\ & -D_{14}(f_4 - f_1) && \text{Transference (1)} \\ & -\sum_{i=2}^3 n_i D_{i4}(f_4 - f_i) && \text{Transference (i)} \\ & -\sum_{j=5}^7 D_{4j}(f_4 - f_j) && \text{Transference (j)} \\ & -K_4 V_4 Z_4 f_4 && \text{Degradation} \\ & \text{----(17)} \end{aligned}$$

【0103】

と表される。ここで、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(1)の項は空気4と噴霧箇所1との間の化合物の移動量を、Transference(i)の項は空気4と大・小粒子2・3との間の化合物の移動量を、Transference(j)の項は空気4と床5・壁6・天井7との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

【0104】

床5・壁6・天井7中の化合物の振る舞いは、Fugacity ( $f_j$   $j=5,6,7$ ) に関する微分方程式として、

【0105】

【数18】

$$\begin{aligned} \frac{df_j}{dt} V_j Z_j &= -\sqrt{D_c/t} A_j Z_j f_j && \text{V-change} \\ &+ \sum_{i=2}^3 R_j n_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition (i)} \\ &- D_{4j} (f_j - f_4) && \text{Transference (4)} \\ &- K_j V_j Z_j f_j && \text{Degradation} \end{aligned}$$

----(18)

【0106】

と表される。ここで、V-changeの項は床5・壁6・天井7の体積変化（時間と共に増加）を、Deposition(i)の項は大・小粒子2・3の落下に伴う付着を、Transference(4)の項は床5・壁6・天井7と空気4との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を示している。

【0107】

上記式(15)ないし(18)の7種の微分方程式を連立してルンゲクッタジル法にて解くことにより、Fugacity ( $f_1 \sim f_7$ ) を算出する。

【0108】

この連立微分方程式を解くときに、予測刻み時間幅 ( $dt$ ) を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間 ( $t_0$ ) での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた ( $t_0 + dt$ ) 時間での微分方程式の解を求めることであり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができるが、計算時間が非常に長

くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

【0109】

そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅が大きく設定されるようにしている。

【0110】

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マスバランスの変動を±5%の精度に設定すると、

$$\text{化合物投入量} / (\text{存在量} + \text{分解量} + \text{排出量}) = 0.95 \sim 1.05$$

の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が±5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

【0111】

ここで、上記化合物投入量は、化合物放出量 ( $A_a$ ) のことである。また、存在量は、連立微分方程式で7種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。分解量及び排出量も以下に示す通りである。

【0112】

【数19】

$$\left. \begin{aligned}
 \text{存在量} &= V_1 Z_1 f_1 + \sum_{i=2}^3 n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 f_k V_k Z_k \\
 \text{分解量} &= K_1 V_1 Z_1 f_1 + \sum_{i=2}^3 K_i n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 K_k f_k V_k Z_k \\
 \text{排出量} &= G V_4 Z_4 f_4 + \sum_{i=2}^3 G n_i V_i Z_i f_i
 \end{aligned} \right\} \text{---(19)}$$

【0113】

図5のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (dt) の設定方法を説明する。

【0114】

まず、予測刻み時間幅 (dt) の初期値を入力し (S21)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば 0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば  $10^{-6}$  [%]) を入力する (S22)。その後、 $t = t_0$  のFugacity及びマスバランスを計算し (S23・S24)、 $t = t + dt$  (あるいは  $t_0 + dt$ ) のFugacity及びマスバランスを計算する (S25・S26)。

【0115】

マスバランスの変動が±5%の範囲内であるかどうかを確認し (S27)、マスバランスの変動が±5%の範囲内であれば、 $t = t$  (あるいは  $t_0$ ) のマスバランスと、 $t = t + dt$  (あるいは  $t_0 + dt$ ) のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する (S28)。S28で上限設定値以上であれば、予測刻み時間幅 (dt) を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間

幅 ( $dt$ ) を  $1/2$  倍して設定を変更し (S 2 9)、S 2 8 で上限設定値より小さければ S 3 0 で  $t = t$  (あるいは  $t_0$ ) のマスバランスと、 $t = t + dt$  (あるいは  $t_0 + dt$ ) のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断する。

【0116】

S 3 0 でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅 ( $dt$ ) を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅 ( $dt$ ) を 2 倍して設定を変更し (S 3 1)、次に、S 3 1 で変更した予測刻み時間幅 ( $dt$ ) が予測刻み時間幅 ( $dt$ ) の最大値 (例えば、0.1 [hour]) 以下であるか否かを判断する (S 3 2)。S 3 2 で予測刻み時間幅 ( $dt$ ) が最大値以下の場合には、解は発散しないので、S 3 1 で設定した予測刻み時間幅 ( $dt$ ) を用いる。一方、S 3 2 で予測刻み時間幅 ( $dt$ ) が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅 ( $dt$ ) を最大値に設定し直す (S 3 3)。また、上記 S 3 0 において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅 ( $dt$ ) は変更せずに計算を続ける。

【0117】

上記 S 2 9、S 3 0、S 3 2、あるいは S 3 3 の工程を経ると、S 2 5 へ戻って再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。

【0118】

一方、S 2 7 において、マスバランスの変動が  $\pm 5\%$  の範囲を越えると、マスバランスの変動が大きいので、変動が  $\pm 5\%$  の範囲内の場合と比較して予測刻み時間幅 ( $dt$ ) を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し (S 3 4)、下限設定値を小さく設定し直してから (S 3 5)、S 2 3 の工程へ戻る。

【0119】

このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動をチェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率よく Fugacity を算出することが可能となる。



## 【0120】

## (3) 経時的室内空气中濃度及び残留量算出 (S4)

化合物の経時的室内空气中濃度は、上記(2)項目で求められた空氣のFugacity ( $f_4$ ) にFugacity capacity ( $Z_4$ ) を掛けたものと、小粒子のFugacity ( $f_3$ ) にFugacity capacity ( $Z_3$ ) を掛けたものとを足し合わせるることによって算出される。尚、薬剤の種類によっては大粒子が人体に吸入される恐れがあるものがあるが、その場合には大・小の粒子のFugacity ( $f_2$ ) ( $f_3$ ) を用いて計算すればよい。

## 【0121】

化合物の残留量は、噴霧箇所1のFugacity ( $f_1$ ) にFugacity capacity ( $Z_1$ ) を掛けたものと、床5のFugacity ( $f_5$ ) にFugacity capacity ( $Z_5$ ) を掛けたものとを足し合わせることによって算出される。尚、噴霧箇所1が皮膚に接する恐れがほとんどない場合には床5のみのFugacity ( $f_5$ ) を用いて計算すればよい。

## 【0122】

## (4) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算 (S6・S7)

前述した経時的室内空气中濃度は、例えば図3(a)に示すような曲線を描く。この濃度曲線を積分し、特定期間 ( $t_1 \sim t_2$ ) における化合物の蓄積濃度を求め(図3(b)参照)、この値から平均室内空气中濃度を算出する。尚、上記特定期間は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

## 【0123】

次に、上記平均室内空气中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{吸入推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] = \text{平均室内空气中濃度} [\text{mg/m}^3] \times \\ \text{呼吸量} [\text{m}^3/\text{kg/min}] \times \text{曝露時間} [\text{min/day}]$$

の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。また、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

【0124】

吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

吸入安全係数 = 吸入無影響量 [ mg/kg/day ] / 吸入推定曝露量 [ mg/kg/day ]  
で表される。

【0125】

(5) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S9・S11)

前述の残留量は、例えば図4 (a) に示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ( $t_1 \sim t_2$ ) における化合物の蓄積残留量を求め (図4 (b) 参照)、この値から平均残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

【0126】

次に、平均残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

経皮推定曝露量 [ mg/kg/day ] = ( 平均残留量 [ mg/m<sup>3</sup> ] ×

皮膚付着率 [ % ] × 接触面積 [ m<sup>2</sup>/day ] ) / 体重 [ kg ]

の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値 (例えば、4 [ m<sup>2</sup>/day ] ) を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床5に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

【0127】

上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布 ( 8cm×10cm ) の上に重し ( 8cm× 8cm× 8cm ; 4.2kg ) を載せ、幼児が動くような速さ ( 120cm/15sec ) でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこ

のモデル実験方法は有用であることが確認された。

【0128】

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

経皮安全係数＝経皮無影響量〔mg/kg/day〕／経皮推定曝露量〔mg/kg/day〕  
で表される。

【0129】

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値も多くない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値を求めることができる。

【0130】

$$\text{経皮安全係数} = \text{経口無影響量} \left[ \text{mg/kg/day} \right] / \left( \text{経皮推定曝露量} \left[ \text{mg/kg/day} \right] \times \text{経皮吸収率} \left[ \% \right] \right)$$

ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば10%）があり、これを用いればよい。

【0131】

（6）経口推定曝露量及び経口安全係数計算（S13・S14）

上記（5）項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づいて、経口推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経口推定曝露量} \left[ \text{mg/kg/day} \right] = \text{経皮推定曝露量} \left[ \text{mg/kg/day} \right] \times \text{手表面積比} \left[ \% \right] \times \text{口移行率} \left[ \% \right]$$

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は（手表面積／体表面積）で表され、その値は文献値（例えば、5〔%〕）を用いればよい。また、口移行率は仮定値であり、例えば100%とする。

【0132】

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

$$\text{経口安全係数} = \text{経口無影響量} \left[ \text{mg/kg/day} \right] / \text{経口推定曝露量} \left[ \text{mg/kg/day} \right]$$

で表される。

【0133】

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、まず環境を、噴霧箇所1と、大・小粒子2・3と、室内全体の空気4、床5と、壁6と、天井7とに分け、これらにおける化合物のFugacityに関する微分方程式を連立して解くことによって、上記化合物を含む薬剤を残留噴霧したときの上記化合物の室内挙動を予測するものである。

【0134】

これにより、環境を7種の媒体と見なし、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮しているので、実際の化合物の挙動に近いシュミレーション結果を得ることが可能となる。

【0135】

また、連立微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、残留噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変して設定される。

【0136】

従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように残留噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

【0137】

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を残留噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するものである。

【0138】

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシュミレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

【0139】

尚、本実施形態では、床5の種類をフローリングとしたが、畳の場合も上記と同様の微分方程式を立てればよい。但し、式(5)の床5のFugacity capacity ( $Z_5$ )を求める際に、粒子構成溶媒成分含有率(表3参照)をフローリングから畳のものに変更する必要がある。また、式(6)の床5の分解定数( $K_5$ )を求める際に、分解半減期をフローリングから畳のものに変更する必要がある。

【0140】

また、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、他の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むことができるので望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得ることが可能である。

【0141】

(実施例1)

上記有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法の実施例について図7ないし図10に基づいて説明すれば、以下の通りである。

【0142】

本実施例における化合物の室内挙動予測方法の評価は、予測によって得られた結果と、実際の化合物の室内挙動を測定して得られた実測値とを比較することによって行われた。

【0143】

まず、実際の化合物の室内挙動の測定について説明する。

使用されたエアゾール缶（300 [ml]）は、0.9 [g] のd-phenothrin（フェノスリン）（商標名；スミスリン， $C_{23}H_{26}O_3$ ：（3-フェノキシフェニル）メチル（1R）-シス-トランス-2，2-ジメチル-3-（2-メチル-1-プロフェニル）シクロプロパンカルボキシレイト）と、1.1 [g] のd-tetramethrin（テトラメスリン）（商標名；ネオピナミンフォルテ， $C_{19}H_{25}O_4$ ：（1，3，4，5，6，7-ヘキサヒドロ-1，3-ジオキソ-2H-イソインドール-2-イル）メチル（1R）-シス-トランス-2，2-ジメチル-3-（2-メチル-1-プロフェニル）シクロプロパンカルボキシレイト）とを含有している。

## 【0144】

また、室内環境は、日本における典型的なアパートの6畳間とした。上記エアゾール缶の表示にしたがって、床や壁より20 [cm] ほど離れた距離から60 [sec/m<sup>2</sup>] の割合で噴霧した。噴霧箇所は、床と壁との境から床方向に幅10 [cm] または15 [cm]、上記境から壁方向に幅10 [cm] または15 [cm] であった（図2参照）。全噴霧期間は、10 [cm] 幅の領域では2.52 [m<sup>2</sup>] につき 2.5分間、15 [cm] 幅の領域では3.78 [m<sup>2</sup>] につき 3.7分間であった。

## 【0145】

部屋の条件を表7に示すように変えて、5種の測定を行った。即ち、連続使用した場合（Example 1）、換気率を変化させた場合（Example 2）、窓を開けた場合（Example 3）、及びエアコンディショナー（以下、エアコンと称する）を作動させた場合（Example 4）の測定と、皮膚付着率のための測定（Example 5）とを行った。

【0146】

【表7】

	Exp 1	Exp 2	Exp 3	Exp 4	Exp 5
測定箇所	空気, 床, 壁, 天井	空気	空気	空気	床, 手, デニムの布
噴霧期間 [min/day]	2.5min/2weeks ×4回	3.7	2.5	2.5	2.5
エアコンの状態	OFF	OFF	OFF	ON	OFF
室温 [°C] 湿度 [%RH]	25 60	25 50	25 60	25 60	25 62
窓の状態	Closed	Closed	5min -open or 2h -open	Closed	Closed
照明条件 照度 [lux]	人工光と自然光 1320	なし 0	基本的になし	なし 0	なし 0
換気率 [h <sup>-1</sup> ]	1.58	0.50 or 1.58 or 4.14	1.86, 10.6	1.56	1.54

【0147】

Example 1では、噴霧は2週間に1度の割合で4回行われた。エアコンは作動させず、部屋の窓は閉めた状態とした。室温は25 [°C]、湿度は60 [%]に制御

した。照明条件は、朝7時から10時までと夜6時から11時までとの間は人工光で室内を照らすと共に、2つの窓を通じて自然光を与えた。換気率は、日本人女性と幼児が居住するのに最低限必要な $1.5 \text{ [h}^{-1}\text{]}$ に設定された。このような条件下において実測した部屋の温度、湿度、照度、及び換気率は表7に示す通りであり、これらの値は測定中の平均値である。この温度、湿度、及び照度の測定は部屋の中央にて行われた。また、換気率は、測定前と後とに確認を行っている。

【0148】

Example 2では、照明条件は自然光をカットし、暗所とした。換気率は、窓を閉めた日本のアパートの実際の換気率が $0.5 \sim 3 \text{ [h}^{-1}\text{]}$ であるので、 $0.5 \sim 4 \text{ [h}^{-1}\text{]}$ に変えて測定を行った。

【0149】

Example 3では、噴霧を行った直後に、エアゾール缶の表示にしたがって5分間もしくは2時間窓を開放した。照明条件は、基本的には暗所としたが（表7において照度 $0 \text{ [lux]}$ ）、窓を開けているときには自然光が入射した（表7において平均照度 $1890 \text{ [lux]}$ ）。

【0150】

上記各測定におけるサンプリング処理は、次のようにして行われた。

Example 1～4では、噴霧してから特定期間後に室内空気をサンプリングした。このとき、d-phenothrin及びd-tetramethrinは、幼児と大人の呼吸領域に対応する位置で、直径が $30 \text{ [}\mu\text{m}]$ 以下の粒子が捕集できるよう空気吸引量を調節して気体状態のみならず浮遊粒子状態の化合物をもサンプリングした。

【0151】

Example 1において、噴霧前に床・壁・天井の中央に、それらと同じ材質の $5 \text{ [cm]} \times 5 \text{ [cm]}$ 片を置いておくことによって、床・壁・天井のサンプリングが行われた。壁に関しては、空気の流入側、排出側、及びそれら以外の横側の3箇所をサンプリングした。

【0152】

空気をサンプリングした捕集管、フローリング片、壁紙片、天井片、手、及び



デニムの布におけるd-phenothrin及びd-tetramethrinは、表8に示す方法で分析された。これらの方法は、BHT（2, 6-ジ-tert-ブチル-p-クレゾール）を含む有機溶剤の抽出液を用い、必要ならばクリーンアップを行って、ガスクロマトグラフィー（GC）に備えつけられた質量分析計（MSD）で分析を行うものである。各プロセスでは、溶剤の蒸発に伴う化合物の揮散を防止するためにジエチレングリコールやオクタノールが加えられる。d-phenothrin（質量 183 [ m/z ] ）とd-tetramethrin（質量 164 [ m/z ] ）共に、次に示すGC条件下で9分で検出された。装置は島津GC-MS QP-1100EX（Mode EI, 70eV）を使用し、205 [℃] から10 [℃/min] の割合で上昇するようにプログラムされたDC-608カラム（内径0.53 [mm] , 長さ30 [ m ] , 厚さ 0.8 [ μm ] ）で、注入及びイオンソース温度は260 [℃] であった。

【0153】

【表8】

媒体	抽出液	クリーンアップ		回収率〔%〕		検出限界
		d-phenothrin	d-tetramethrin	d-phenothrin	d-tetramethrin	
補集管	ヘキサン /アセトン	なし	なし MBE-FL	103	107	0.05 〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕
床	ジクロロメタン		FL	92.7	78.3	8〔 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ 〕
壁	ヘキサン	GPC	MBE-FL MBE-FL	93.2	89.8	8〔 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ 〕
天井						
手	2-プロパノール	MBE-NH <sub>2</sub>	SI	87.7	92.8	0.05 〔 $\mu\text{g}/\text{hand}$ 〕
天井の布	ヘキサン		MBE-FL	92.8	103	8〔 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ 〕

注) MBE: メガボンドエルト、FL: フロリジル、SI: シリカゲル、GPC: ゲル浸透カラム

【0154】

上記の方法で測定したd-phenothrin及びd-tetramethrinの空气中濃度と床・壁

・天井の残留量との結果について説明する。

【0155】

空气中濃度に関して、Example 1 では、2週間に1度(2.5分間)の割合で8週間に渡って噴霧した時間を含んで、125日間測定された。図7に示すように、空气中濃度は噴霧直後に最高値を示し、d-phenothrinに関しては床の中心から25 [cm] と 120 [cm] の高さでの平均が  $752 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ 、d-tetramethrinに関しては  $1040 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$  であり、その後急速に減少した。このとき、空气中での化合物の半減期が両方とも20分程度で短いため、噴霧期間である8週間の間に4度のピークを有する形となった。また、噴霧期間後の空气中濃度は、両者とも  $0.10 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$  よりも少なかった。さらに、床上25 [cm] と 120 [cm] の高さとは、濃度にほとんど差はなかった。また、噴霧の回数の増加に伴う空气中濃度の増加は見られなかった。尚、図7において、検出限界 ( $0.05 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ ) 未満で測定不可能であった濃度に関しては、検出限界でプロットしている。

【0156】

8週間で放出された全噴霧量は、 $1.11 [\text{g}]$  のd-phenothrin及び  $1.38 [\text{g}]$  のd-tetramethrinを含む  $250 [\text{g}]$  であり、これは  $300 [\text{ml}]$  のエアゾール缶 1.2本分に等しい。残留噴霧用の  $300 [\text{ml}]$  のエアゾール缶は日本で年間500万本売られているので、一件当たりに使用される年間消費量は0.13本と計算される。これにより、測定で使用した噴霧量(1部屋につき1.3本)は、実際の年間消費量よりもかなり多いことがわかる。

【0157】

表9に示すように、噴霧期間中の平均空气中濃度、及び8週間の噴霧期間を含む年間の平均空气中濃度は、d-phenothrinが  $2.35 [\mu\text{g}/\text{m}^3] / 0.43 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ 、d-tetramethrinが  $3.25 [\mu\text{g}/\text{m}^3] / 0.53 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$  と計算される。これにより、d-tetramethrinに対するd-phenothrinの空气中での存在量は、エアゾール缶内での存在比に対応していることがわかる。尚、表9では、検出限界値未満のものについては検出限界値を用いて平均空气中濃度を計算している。

【0158】

【表9】

化合物	期間	空气中濃度 [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]		残留量 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]		
		25[cm]	120[cm]	床	壁	天井
d-phenothrin	噴霧期間	2.35	2.35	2200	33	27
	年間	0.41	0.45	360	7	9
d-tetramethrin	噴霧期間	3.31	3.19	2500	43	34
	年間	0.54	0.52	400	15	30

【0159】

Example 2において、換気率を変えて噴霧後 3.7分経ってからのd-phenothrin 及びd-tetramethrinの空气中濃度を測定した。図8 (a) にはd-phenothrinの結果のみを示す。これにより、換気率 $1.58 [\text{h}^{-1}]$ での空气中での半減期は21分、換気率 $0.50 [\text{h}^{-1}]$ では58分、換気率 $4.14 [\text{h}^{-1}]$ では11分であることがわかった。

【0160】

Example 3において、2.5分間薬剤を噴霧した直後に窓を開けてd-phenothrin 及びd-tetramethrinの空气中濃度を測定した。図8 (b) にd-phenothrinの結果を示す。これによれば、窓を5分間開放した場合の半減期は14分、2時間の場合では4分、窓を閉めたままでは20分であることがわかった。また、窓を開けた状態での平均濃度 (5分開けた場合で $2.88 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ 、2時間開けた場合で $1.19 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ ) は、開けてない状態 ( $14.8 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ ) の $1/5$ 未満であった。

【0161】

尚、図8の測定値は、床から25 [cm] と 120 [cm] の高さでサンプリングした空氣の濃度の平均値である。また、検出限界未満で測定不可能な場合には検出限界値( $0.05 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$ ) としてプロットしている。

【0162】

上記の半減期についてまとめたものを表10に示す。この結果、残留噴霧では

、部屋の換気、特に噴霧直後に窓を開けることが、空气中濃度に非常に影響を及ぼすことがわかった。尚、表10には参考として薬剤を空間に噴霧したときの化合物 (d-resmethrin及びd-tetramethrin) の空气中での半減期を記している。

【0163】

【表10】

測定	換気率 or 窓の状態	残留噴霧の半減期 [min]		空間噴霧の半減期 [min]	
		d-phenothrins	d-tetramethrin	d-resmethrin	d-tetramethrin
Exp1	1.58[h <sup>-1</sup> ]	20	20	16	23
Exp2	0.50[h <sup>-1</sup> ]	58	58	—	49
	1.58[h <sup>-1</sup> ]	21	22	—	19
	4.14[h <sup>-1</sup> ]	11	11	—	8
Exp3	5 min open	14	14	9	12
	2 h open	4	4	4	3

【0164】

ところで、例えば、Example 3のように窓を開けた状態では、光分解による半減期を推定すると、化合物の構造から前述のAtmospheric Oxidation programか

らd-phenothrinで 2.1時間、d-tetramethrinで 1.7時間であると考えられている。従って、表10に示すように、空気中での半減期は上記光分解による半減期よりも短いため、d-phenothrin及びd-tetramethrinの濃度減少は、主に光分解ではなく換気によって引き起こされると考えられる。

【0165】

Example 4において、エアコンを使用した場合の平均濃度（d-phenothrinが11.6 [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]、d-tetramethrinが15.5 [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]）と、使用しない場合の平均濃度（d-phenothrinが14.8 [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]、d-tetramethrinが20.2 [ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]）とを比較すると、ほとんど同じであった。これにより、空気の対流とエアコンのフィルタへの薬剤の吸収が空気中濃度に及ぼす影響はほとんど無視できることがわかった。

【0166】

床・壁・天井の残留量に関して、Example 1で床・壁・天井における 125日間の残留量を測定した結果を図9及び前記表9に示す。尚、図9及び表9における壁の残留量の値は、空気の流入側及び排出側での値と、それらの横側での値を平均したものであり、図9の壁・天井の残留量は、壁と天井の残留量を平均した値をプロットしている。

【0167】

空気の流入出によって、流入側での壁の残留量（d-phenothrinが28 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]、d-tetramethrinが35 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]）は、排出側や横側での壁の残留量（排出側で45 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]と58 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]、横側で33 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]と43 [ $\mu\text{g}/\text{m}^2$ ]）よりも少なかった。また、d-phenothrin及びd-tetramethrinの残留量は噴霧回数が増すにつれて増大するが、噴霧後には徐々に減少した。このときのd-phenothrin及びd-tetramethrinの床での半減期はそれぞれ13日、20日、壁・天井での半減期は各々31～41日、24～75日であった。これらの値は、上述の空気中での半減期よりも長くなっているが、それは床・壁・天井の素材に酸化防止剤が大量に含まれているからである。また、薬剤を噴霧した箇所を除いて、床残留量が壁や天井の残留量よりも多くなっているのは、浮遊粒子が床に付着するからである。

## 【0168】

Example 5では、化合物が残留する床に直接手を押さえつける手付着試験と、手の代わりにデニムの布を用いた拭き取り試験とを行うことによって、フローリングにおけるd-phenothrin及びd-tetramethrinの皮膚付着率が測定された。スチューデントのt検定 ( $P \leq 0.05$ ) を行ったところ、拭き取り試験によって得られた皮膚付着率（噴霧6時間後でd-phenothrinが0.31 [%] , d-tetramethrinが0.33 [%]、噴霧24時間後でそれぞれ0.17 [%] , 0.09 [%]）は、手付着試験によって得られた結果（噴霧6時間後でそれぞれ0.22 [%] , 0.32 [%]、噴霧24時間後でそれぞれ0.06 [%] , 0.07 [%]）と同等か、もしくはそれよりも高かった。これにより、拭き取り試験のみで皮膚付着率を決定しても、経皮曝露の安全性を推定する際に十分であることがわかった。

## 【0169】

次に、本願発明の化合物の室内挙動予測方法に基づいて得られたシュミレーション結果について説明する。このときの条件は、上記Example 1と同じ条件とした。また、1次条件としては、実施形態1の表1ないし表4に記載された数値を入力した。

## 【0170】

噴霧2.5分後から24時間後までの間のd-phenothrinの残留噴霧による振る舞いをシュミレートしたところ、表11に示す結果が得られた。尚、表中の“浮遊期間”は、2.4[m]より低い位置に浮遊している粒子が床上に落ちるか、空気中で消滅するまでの期間のことであり、“移動量”は、全噴霧量に対して24時間以内に移動した化合物量の割合のことである。

【0171】

【表11】

挙動	FROM	TO	割合
直径の変化 of 大粒子 小粒子	20 [ $\mu\text{m}$ ] 5 [ $\mu\text{m}$ ]	3.6 [ $\mu\text{m}$ ] 0.9 [ $\mu\text{m}$ ]	(35 秒間の变化) (2.2秒間の变化)
浮遊期間 of 大粒子 小粒子	0 [h] 0 [h]	2.0 [h] 30 [h]	
移動量	空気 (粒子含) 空気 (粒子含) 空気 (粒子含) 空気 (粒子含) 噴霧箇所 床 壁 天井	噴霧箇所 床 壁 天井 空気 空気 空気 空気	1.0 [%] 7.0 [%] 0.44 [%] 0.10 [%] 0.16 [%] 0.15 [%] 0.0011 [%] 0.00023 [%]
換気量	室内	室外	29 [%]
分解量 in 噴霧箇所 空気 (粒子含) 床 壁 天井			1.7 [%] 3.2 [%] 0.35 [%] 0.0080 [%] 0.0018 [%]
残留量 in 噴霧箇所 空気 (粒子含) 床 壁 天井			58 [%] 0.00060 [%] 6.5 [%] 0.42 [%] 0.10 [%]

【0172】

これによれば、大粒子(直径20 [ $\mu\text{m}$ ]) 中の主な溶剤は35秒後に完全に蒸発し、2時間後に空気中から消滅した。また、小粒子(直径5 [ $\mu\text{m}$ ]) 中の主な溶剤は2.2 秒後に完全に蒸発し、30時間空気中に存在した。粒子を含む空気中の薬剤(噴霧直後の薬剤量の40 [%]) は、24時間以内に噴霧箇所へ1.0 [%]、床に7.0 [%]、壁に0.44 [%]、天井に0.10 [%] 分布し、残りの29 [%] は室外へ、3.2 [%] は空気中で分解された。噴霧箇所における薬剤(噴霧直後の薬剤量の60 [%]) は、24時間以内に噴霧量の0.16 [%] が空気中へ蒸発し、1.7 [%] は光・酸化分解し、残りの58 [%] は噴霧箇所へ残留した。



## 【0173】

上記空気中濃度と噴霧箇所及び床・壁・天井の残留量とに関するシュミレーション結果と、前述の実測値とを比較したところ、図10に示す通りとなった。図において、実線はシュミレーション結果を示し、プロットは実測値を示している。このときの実測値はExample 1の結果から導き出したものである。

## 【0174】

これにより、本願発明の化合物の室内挙動予測方法に基づく予測結果は、実測値に非常に近いことがわかる。即ち、残留噴霧すると、空気中の大部分の薬剤は、室外に排出されるか、または床に落下する。噴霧箇所の薬剤は床や壁中に浸透し、わずかに分解あるいは蒸発した。

## 【0175】

次に、本願発明の化合物の安全性評価方法に基づいて得られた結果について説明する。ここでは、8週間に4回（1回につき2.5分間噴霧）、床と壁との境に薬剤を残留噴霧したときの、幼児を含む居住者に対するd-phenothrin及びd-tetramethrinの室内曝露量を評価した。

## 【0176】

居住者は、空気中に存在するd-phenothrin及びd-tetramethrinの蒸気あるいは粒子を吸入する。ヒトは直径8〔 $\mu\text{m}$ 〕以下のエアゾール粒子を肺まで吸入するので、上述のように30〔 $\mu\text{m}$ 〕以下の粒子と蒸気薬剤とをサンプリングすれば、吸入曝露の評価にとっては十分である。

## 【0177】

前記実施形態1の（4）項で説明したように、平均室内空気中濃度（表9の“噴霧期間”参照）と、呼吸量と、曝露時間とを用いて計算した吸入推定曝露量を以下の表12に示す。ここで、日本人の室内での平均呼吸量は、大人が0.220〔L/min/kg〕、幼児が0.235〔L/min/kg〕である。また、曝露時間は、噴霧後24時間部屋に閉じ込められた最悪の場合を考えて、24〔h/day〕と仮定した。

【0178】

【表12】

化合物	対象	吸入（窓閉）	吸入（窓開）	経皮	経口
d-phenothrin	幼児 大人	0.795 0.744	0.159 0.149	2.71 0.553	0.135 —
d-tetramethrin	幼児 大人	1.12 1.01	0.224 0.202	2.15 0.438	0.107 —

【0179】

尚、表において、“窓閉”とは上記曝露時間中窓を閉めた場合であり、“窓開”とは窓を閉めた状態で噴霧を行い、その後5分間窓を開けた場合（Example 3）である。

【0180】

また、表12には、前記実施形態1の（5）項で説明したように、床の平均残留量（表9の“噴霧期間”参照）、皮膚付着率、接触面積、及び体重を用いて計算した経皮推定曝露量を示している。このとき、幼児と大人に対する接触面積を  $4.0 \text{ [m}^2/\text{day]}$ 、幼児の体重を  $10.2 \text{ [kg]}$ 、大人の体重を  $50 \text{ [kg]}$  とした。また、d-phenothrin及びd-tetramethrinのフローリングでの皮膚付着率は、前述のExample 5の測定値の積分と外挿とから評価した値を用いた。即ち、皮膚付着率はd-phenothrinが  $0.31 \text{ [%]}$ 、d-tetramethrinが  $0.25 \text{ [%]}$  であり、経皮推定曝露量の計算にはこれらの値が用いられた。

【0181】

さらに、表12には、前記実施形態1の（6）項で説明したように、経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率を用いて計算した経口推定曝露量を示している。このとき、手表面積比を約  $5 \text{ [%]}$  とし、口移行率を最悪の場合の  $100 \text{ [%]}$  と仮定し、幼児のみの経口推定曝露量が計算された。

【0182】

上記の計算で求められた吸入推定曝露量、経皮推定曝露量、及び経口推定曝露量に基づいて得られる吸入安全係数、経皮安全係数、並びに口安全係数をまとめたものを表13に示す。同時に、上記3つの安全係数より求められる総合安全係

数も表中に記している。また、d-phenothrinの安全係数（吸入、経皮、あるいは経口）及びd-tetramethrinの安全係数（吸入、経皮、あるいは経口）の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることによって算出されるd-phenothrinとd-tetramethrinとの両方に対する安全係数も表中に示している。

【0183】

【表13】

化合物 対象	吸入 (窓閉)	吸入 (窓開)	経皮	経口	総合 (窓閉)	総合 (窓開)
d-phenothrin 幼児 大人	23,100 24,700	116,000 124,000	369,000 1,810,000	923,000 —	21,300 24,400	80,400 116,000
d-tetramethrin 幼児 大人	2,880 3,190	14,400 15,900	465,000 2,280,000	100,000 —	2,780 3,180	12,200 15,800
両方 幼児 大人	2,560 2,820	12,800 14,100	206,000 1,010,000	90,300 —	2,460 2,820	10,600 13,900

【0184】

尚、d-phenothrinに関するラットの無影響量は、吸入が18.4 [ mg/kg/day] (

=無影響気中濃度  $210 \text{ [mg/m}^3\text{]} \times \text{ラットの呼吸量 } 0.365 \text{ [L/min/kg]} \times \text{ラットの曝露時間 } 4 \text{ [h/day]}$  ; 週6日曝露で4週間の試験)、経皮が  $1000 \text{ [mg/kg/day]}$  (21日間の試験)、経口が  $125 \text{ [mg/kg/day]}$  (6か月間の試験)であった。また、d-tetramethrinに関するラットの無影響量は、吸入が  $3.22 \text{ [mg/kg/day]}$  (=無影響気中濃度  $49 \text{ [mg/m}^3\text{]} \times \text{ラットの呼吸量 } 0.365 \text{ [L/min/kg]} \times \text{ラットの曝露時間 } 3 \text{ [h/day]}$  ; 週7日曝露で4週間の試験)、経皮が  $1000 \text{ [mg/kg/day]}$  (21日間の試験)、経口が  $10.75 \text{ [mg/kg/day]}$  (6か月間の試験)であった。

【0185】

この結果、幼児の安全係数は、大人のそれよりも低いことが確認されると共に、経皮安全係数を除いて、d-phenothrinの安全係数の方がd-tetramethrinの安全係数よりも高いことがわかった。また、3つ内で吸入安全係数が最も低いので、3種の曝露ルートのすべてで曝されたときには吸入安全係数が総合安全係数の値をほぼ決定することになる。

【0186】

〔実施の形態2〕

本発明の第2の実施形態について図1及び図6に基づいて説明すれば、以下の通りである。なお、説明の便宜上、前記の実施の形態の図面に示した部材と同一の部材には同一の符号を付記し、その説明を省略する。ここでは、噴霧箇所の種類のみをカーペットとし(例えば、図2中のcで示す床噴霧域がカーペットであるとする)、それ以外の床は単なる平面として取り扱った場合について説明し、実施形態1と異なる部分のみの説明を行う。

【0187】

尚、床(全面)の種類もカーペットとしてよいが、噴霧箇所以外の床には浮遊粒子が落下するだけであり、床がフローリングの場合の挙動と大きく変わらないので、床のFugacity capacity は粒子構成溶媒成分含有率で補正するだけでよいことが多い。

【0188】

まず、カーペットを図6に示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、

基材の上に植設された複数のカーペット繊維（繊維の穂立ち）とそれらの繊維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカーペットが床全面に敷かれた部屋で薬剤を残留噴霧すると、噴霧箇所のカーペット繊維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。

【0189】

本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法も、図1のフローチャートにしたがうが、S1では、1次条件として、実施形態1の1次条件（表1～表4参照）に、表14に示すカーペット関連1次条件が追加される。尚、カーペットの空間部分の断面積（ $A_c$ ）は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである（図6参照）。

【0190】

【表14】

カーペット関連1次条件	記号	数値例
カーペット カーペットの空間部分の断面積 カーペット繊維が空間部分の化合物と接触する面積 カーペット繊維が化合物と接触する面積	$A_c$ $A_{c1}$ $A_{a1}$	$1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床]}$ $0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床]}$ $1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床]}$
製品の性質 製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率 製品の希釈倍率	$C_{sd}$ $X_{sol}$	

【0191】

尚、表14における数値例は、図6に示す数値に基づいたものである。ここでは、1つの空間部分を  $0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ 、1角のカーペット繊維を  $2.5 \text{ [mm]} \times 2.5 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$  の大きさとしている。また、 $1 \text{ [cm}^2\text{]}$  中に16〔個〕のカーペット繊維があるものとする。

【0192】

この場合には、各パラメータは、

$$\begin{aligned} A_c &= (0.1 [\text{mm}] \times 0.1 [\text{mm}] \times 16 [\text{個}]) / 1 [\text{cm}] \\ &= 1.6 \times 10^{-3} [\text{m}^2/\text{m}^2 \text{床}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{c1} &= (0.1 [\text{mm}] \times 3 [\text{mm}] \times 4 [\text{面}] \times 16 [\text{個}]) / 1 [\text{cm}] \\ &= 0.192 [\text{m}^2/\text{m}^2 \text{床}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_1 &= 1 - A_c \\ &= 1 - 1.6 \times 10^{-3} [\text{m}^2/\text{m}^2 \text{床}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{a1} &= A_1 + A_{c1} \\ &= 1.19 [\text{m}^2/\text{m}^2 \text{床}] \end{aligned}$$

と求めることができる。ここで、 $A_1$  は、実施形態1では噴霧箇所の占有面積であったが、 $1 [\text{m}^2]$  中のカーペット繊維が室内空気と接する面積に置換する。

【0193】

S2における2次条件としては、実施形態1の2次条件に、表15に示すカーペット関連2次条件が追加される。尚、 $k_1$  及び $V_1$  は、実施形態1（表6参照）では噴霧箇所中の化合物の移動速度、及び噴霧箇所の体積であったが、各々カーペット繊維内での化合物の移動速度、及びカーペットの全繊維の体積に置換することとする。

【0194】

【表15】

カーペット関連2次条件	記号
一義的要因条件	
空間部分の薬剤の蒸発定数	$R_d$
空間部分の温度 ( $T_d$ ) での湿度	$H_m$
カーペットの全繊維の体積	$V_1$
製品中の化合物の移動速度	$k_c$
製品の性質変化定数	$a$
経時的変化条件	
空間部分の薬剤と空気との間の 化合物の移動係数	$D_{cl}$
空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の 化合物の移動係数	$D_{cl}$
空間部分の薬剤の体積	$V_c$
空間部分の薬剤のFugacity capacity	$Z_c$

【0195】

上記表15に示した一義的要因条件及び経時的変化条件の算出法を、水性エアゾール使用の場合、即ち粒子構成溶媒が水の場合を例にして以下に説明する。

【0196】

カーペットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 ( $R_d$ ) は、空間部分の断面積 ( $A_c$ )、室温 ( $T$ )、及び湿度 ( $H$ ) より、

【0197】

【数20】

$$R_d = A_c h (H_m - H) / C_H \quad \text{--- (20)}$$

$$C_H = 0.24 + 0.46H$$

$$h = 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3}$$



【0198】

と表される。ここで、 $T_d$  はカーペットの空間部分の温度（湿球温度に相当）であり、 $H_m$  は $T_d$  における空間部分の湿度（湿球温度での飽和湿度に相当）である。尚、 $T_d$  及び $H_m$  は、室温（ $T$ ）及び湿度（ $H$ ）に基づき、前述の「質量基準湿度表」から求めることができる。オイルベースの製品（エアゾール）の場合、水とオイルの性質を比較し、 $R_d$  に乗じて薬剤の蒸発定数を算出することができるが、オイルの蒸発が遅い場合 $R_d = 0$ としてもよい。カーペットの空間部分に入り込んだ薬剤は、蒸発によってその体積が減少し、最後には化合物を残して消えてしまう。そして、残った化合物がカーペット繊維にしみ込むことになる。

【0199】

カーペットの全繊維の体積（ $V_1$ ）は、床・壁・天井中の拡散係数（ $D_c$ ）及びカーペット繊維が化合物と接触する面積（ $A_{a1}$ ）に基づいて、以下のように求められる。

【0200】

【数21】

$$V_1 = 2\sqrt{D_c/t} A_{a1}A_t \quad \text{---- (21)}$$

【0201】

製品中の化合物の移動速度（ $k_c$ ）は、室内空気における化合物の移動速度を示す $k_4$ （ $=GV_4/A_4$ ）を用いて、 $k_4/100$ と表される。

【0202】

カーペットの空間部分の薬剤と空気との間の化合物の移動係数（ $D_{c4}$ ）は、上記製品中の化合物の移動速度（ $k_c$ ）、室内空気における化合物の移動速度（ $k_4$ ）、噴霧箇所の面積（ $A_t$ ）、空間部分の断面積（ $A_c$ ）、後述の式（24）で求められる空間部分の薬剤のFugacity capacity（ $Z_c$ ）、及び実施形態1の式（4）で求められる空気のFugacity capacity（ $Z_4$ ）より、次のように表される。

【0203】

【数22】

$$D_{c4} = \frac{1}{1/(k_c A_c A_t Z_c) + 1/(k_4 A_c A_t Z_4)} \quad \text{--- (22)}$$

【0204】

空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の化合物の移動係数 ( $D_{c1}$ ) は、製品中の化合物の移動速度 ( $k_c$ )、拡散係数 ( $D_c$ )、噴霧箇所の面積 ( $A_t$ )、カーペット繊維が空間部分における化合物と接触する面積 ( $A_{c1}$ )、空間部分の薬剤のFugacity capacity ( $Z_c$ )、及び実施形態1の式(2)で求められる床のFugacity capacity ( $Z_1$ ) より、

【0205】

【数23】

$$D_{c1} = \frac{1}{1/(k_c A_{c1} A_t Z_c) + 1/(k_1 A_{c1} A_t Z_1)} \quad \text{--- (23)}$$

【0206】

と表される。但し、カーペット繊維内での化合物の移動速度 ( $k_1$ ) は、( $D_c / t$ )<sup>0.5</sup>と表される。

【0207】

空間部分の薬剤の体積 ( $V_c$ ) は、噴霧箇所の面積 ( $A_t$ )、粒子構成溶媒放出量 ( $O_a$ )、及び式(20)で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 ( $R_d$ ) より求まる。この空間部分の体積 ( $V_c$ ) は、薬剤中の溶媒が完全に蒸発するまで減少する。

【0208】

空間部分の薬剤のFugacity capacity ( $Z_c$ ) は、化合物の蒸気圧 ( $P^s$ )、水溶解度 ( $C^s$ )、オクタノール／水分配係数 ( $K_{ow}$ )、及び製品の性質変化定数 ( $a$ ) より、次のように表される。

【0209】

【数24】

$$Z_c = (e^{-at} K_{ow} + 1 - e^{-at}) C^s / P^s \quad \text{--- (24)}$$

【0210】

ここで、製品の性質変化定数（ $a$ ）は、式（20）で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数（ $R_d$ ）、製品中に含まれる溶剤（Xylene）の含有率（ $C_{sd}$ ）、及び製品の希釈倍率（ $X_{sol}$ ）に基づき算出することができる。即ち、空間部分の薬剤のFugacity capacity（ $Z_c$ ）は、

$$Z_c = \{ (\text{製品中の有機溶剤の比率}) K_{ow} + (\text{製品中の水の比率}) \} \times C^s / P^s$$

とも表され、この式と前記式（24）とを連立することにより、製品の性質変化定数（ $a$ ）が算出される。尚、オイルベースの製品（エアゾール）の場合、空間部分の薬剤のFugacity capacity（ $Z_c$ ）は、化合物の蒸気圧（ $P^s$ ）、水溶解度（ $C^s$ ）、オクタノール／水分配係数（ $K_{ow}$ ）により、実施形態1の式（5）で与えられる。

【0211】

これにより、カーペットの空間部分の化合物の振る舞いは、Fugacity（ $f_c$ ）に関する微分方程式として、以下のように示される。

【0212】

【数25】

$$\frac{df_c}{dt} V_c Z_c = \sum_{i=1}^3 n_i R_1 A_c V_i Z_i f_i \quad \text{Deposition (i)}$$

$$\begin{aligned} \text{F-change} \quad & +R_d A_t Z_c f_c \quad \text{V-change} \\ & -D_{c1}(f_c - f_1) \quad \text{Transference (j)} \\ & -D_{c4}(f_c - f_4) \quad \text{Transference (5)} \\ & -K_c V_c Z_c f_c \quad \text{Degradation} \end{aligned}$$

----(25)

【0213】

また、実施形態1における式(15)及び式(17)を、

【0214】

【数26】

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{dt} V_1 Z_1 &= \sqrt{D_c/t} A_{a1} A_t Z_1 f_1 \quad \text{V-change} \\ \text{F-change} \quad & + \sum_{i=2}^3 n_i A_1 A_t V_i Z_i f_i \quad \text{Deposition (i)} \\ & -D_{c1}(f_1 - f_c) \quad \text{Transference (C)} \\ & -D_{14}(f_1 - f_4) \quad \text{Transference (1)} \\ & -K_1 V_1 Z_1 f_1 \quad \text{Degradation} \end{aligned}$$

----(26)

【0215】

【数27】

$$\begin{aligned} \frac{df_L}{dt} V_L Z_L = & -GV_L Z_L f_L && \text{Ventilation} \\ & - \sum_{i=2}^3 n_i D_{iL} (f_L - f_i) && \text{Transference (i)} \\ & - \sum_{j=5}^7 D_{Lj} (f_L - f_j) && \text{Transference (j)} \\ & - K_L V_L Z_L f_L && \text{Degradation} \\ & - D_{cL} (f_L - f_c) && \text{Transference (c)} \\ & - D_{1L} (f_L - f_1) && \text{Transference (1)} \end{aligned}$$

----(27)

【0216】

にそれぞれ置換する。

【0217】

式(26)において、V-changeの項はカーペット繊維の体積変化(時間と共に増加)を、Deposition(i)の項は粒子の落下に伴う付着を、Transference(c)の項はカーペット繊維と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(1)の項はカーペット繊維と空気との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

【0218】

また、式(27)において、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(i)の項は空気と粒子との間の化合物の移動量を、Transference(j)の項は空気と床・天井・壁との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を、Transference(c)の項は空気と噴霧箇所との空間部分

との間の化合物の移動量を、Transference(1)の項は空気と噴霧箇所のカーペット繊維との間の化合物の移動量を各々示している。

【0219】

従って、S3でのFugacity計算は、実施形態1の式(16)、(18)、及び上記(25)ないし(27)の8種の微分方程式をルンゲクッタ法で解くことによって行われる。その後のS4ないしS17の工程は、実施形態1と同様である。

【0220】

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、噴霧箇所の種類が繊維の穂立ちと穂立ち間の空間部分とを有するカーペットの場合には、噴霧箇所、2種の浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井における化合物のFugacityに関する7種の連立微分方程式に、上記カーペットの空間部分のFugacityの微分方程式を加えて、各Fugacityを計算するものである。

【0221】

これにより、空間部分に薬剤が溜まることから平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なる場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシュミレーションが行える。

【0222】

【発明の効果】

以上のように、本発明の請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、有害生物防除活性化合物を含む溶液を残留噴霧するときに、噴霧箇所と、大きさに応じて2種に分けた浮遊粒子と、室内全体の空気と、床と、壁と、天井とにおける上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって上記化合物の室内挙動を予測する方法である。

【0223】

これにより、環境を7種の媒体と見なし、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮しているので、従来では予測することができなかった残留噴霧における化合物の振る舞いを予測することができると共に、実際の化合物の挙動に近いシュミレーション結果を得ることが可能となるという効果を奏する。

【0224】

請求項2に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、請求項1に記載の方法に加えて、上記連立微分方程式を解くときに、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、残留噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定すること方法である。

【0225】

これにより、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定されるので、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となるという効果を奏する。

【0226】

請求項3に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、請求項1又は2に記載の方法に加えて、上記床（特に噴霧箇所）の種類が繊維の穂立ちを有する敷物の場合には、上記連立微分方程式に上記敷物の条件に基づく微分方程式を加える方法である。

【0227】

これにより、床上に繊維の穂立ちを有する敷物を敷いている場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシュミレーションが行うことができるという効果を奏する。

【0228】

請求項4に記載の有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、請求項1に記載の室内挙動予測方法の予測結果に基づいて、上記溶液を残留噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価する方法である。

【0229】

これにより、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となるので、上記化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシュミレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなるという効果を奏する。

【0230】

尚、請求項5に記載したように、有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法をコンピュータプログラムとして実現することもできる。

【図面の簡単な説明】

【図1】

本発明にかかる実施形態1の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いて人体に対する安全性を評価する安全性評価方法を示すフローチャートである。

【図2】

上記化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデルを示す説明図である。

【図3】

(a)は室内空気中濃度の経時的变化を示すグラフであり、(b)は上記グラフを用いて平均室内空気中濃度を求める場合の説明図である。

【図4】

(a)は残留量の経時的变化を示すグラフであり、(b)は上記グラフを用いて平均残留量を求める場合の説明図である。

【図5】

予測刻み時間幅の設定方法を示すフローチャートである。

【図6】

本発明にかかる実施形態2の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーペットのモデル化状態を示す説明図である。

【図7】

上記実施形態1の実施例1における空気中濃度の経時的变化を示すグラフである。

【図8】

上記実施例1における空気中濃度の経時的变化を示すグラフであり、(a)は換気率を変えたとき、(b)は窓を開閉させたときをそれぞれ示している。



【図9】

上記実施例1における残留量の経時的变化を示すグラフであり、(a)は床の残留量、(b)は壁及び天井の残留量をそれぞれ示している。

【図10】

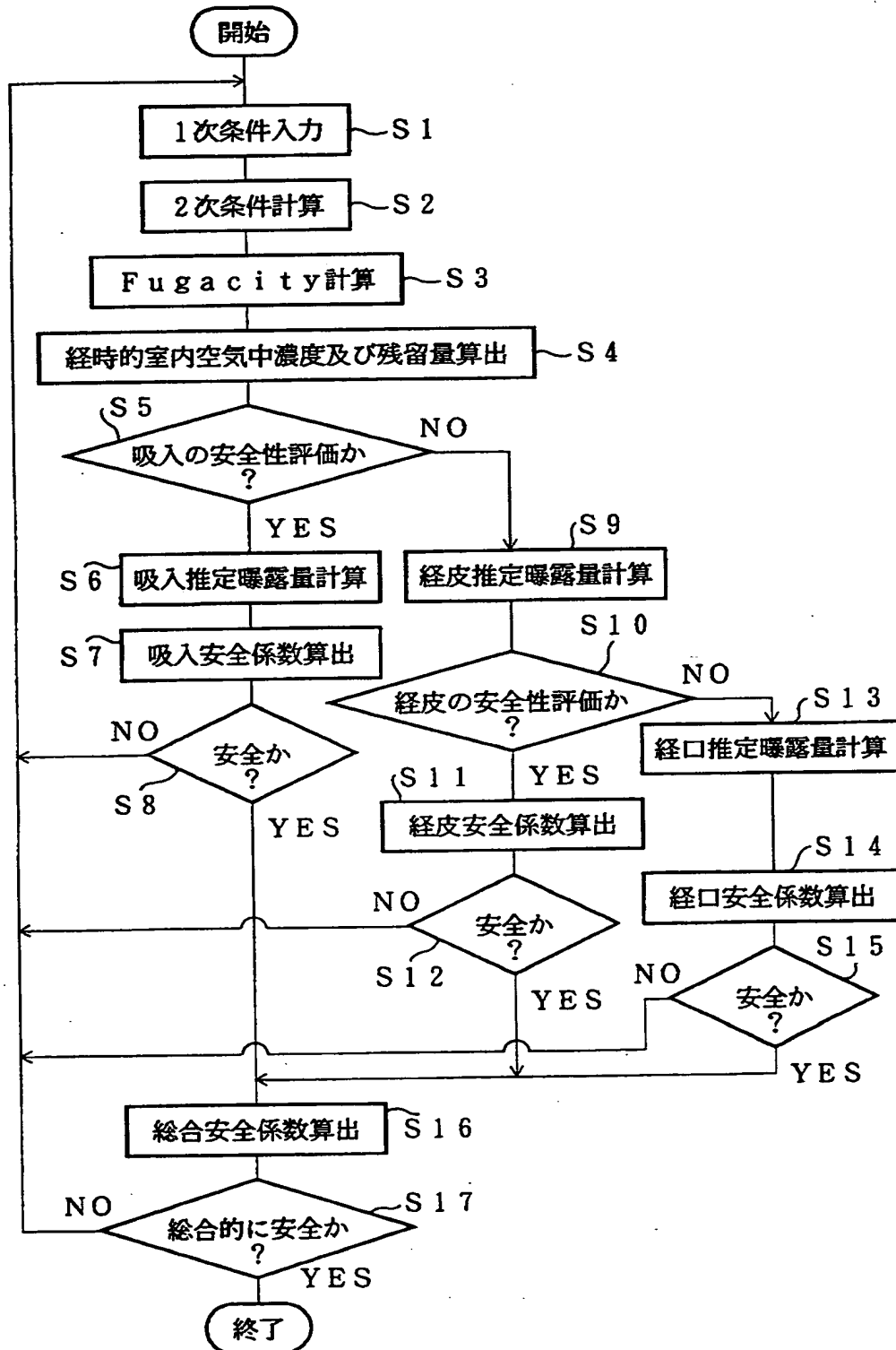
上記実施例1における実測値とシミュレーション結果とを比較したグラフであり、(a)は空気中濃度の場合、(b)は噴霧箇所、床、壁、及び天井の残留量の場合をそれぞれ示している。

【符号の説明】

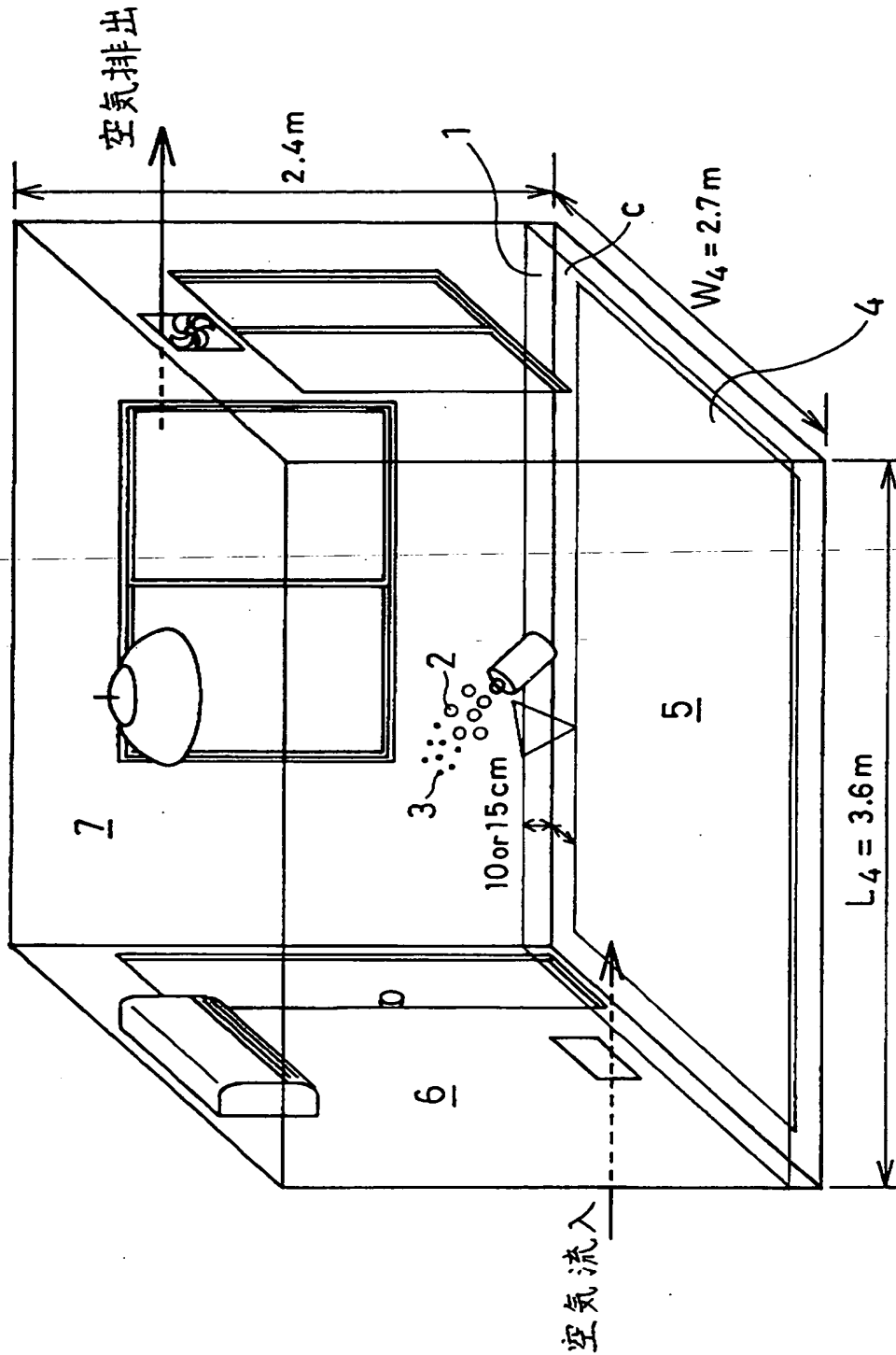
- 1 噴霧箇所
- 2 大粒子（浮遊粒子）
- 3 小粒子（浮遊粒子）
- 4 空気
- 5 床
- 6 壁
- 7 天井

【書類名】 図面

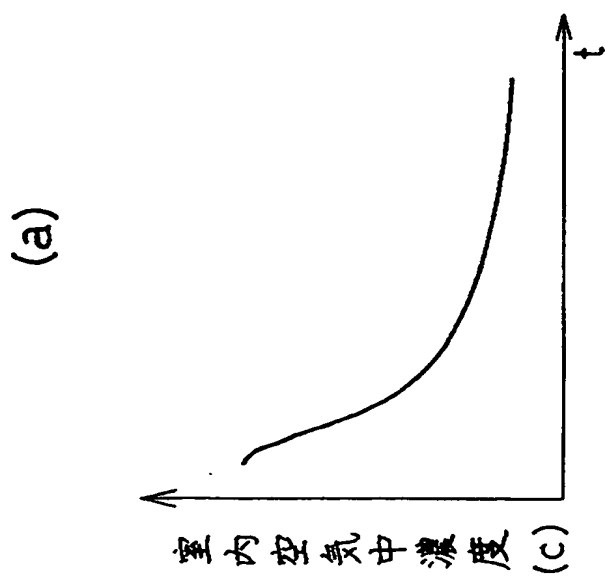
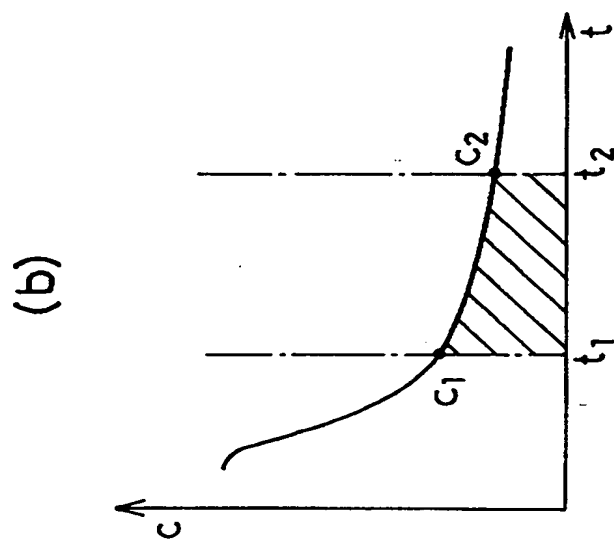
【図1】



【图 2】

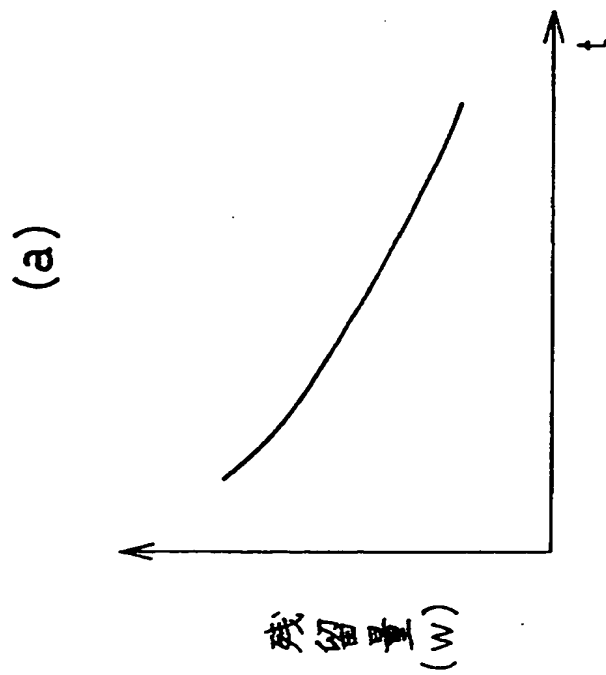
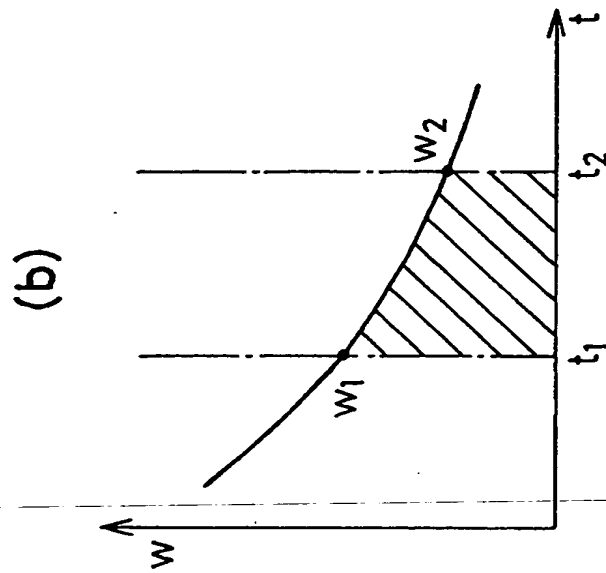


【图 3】

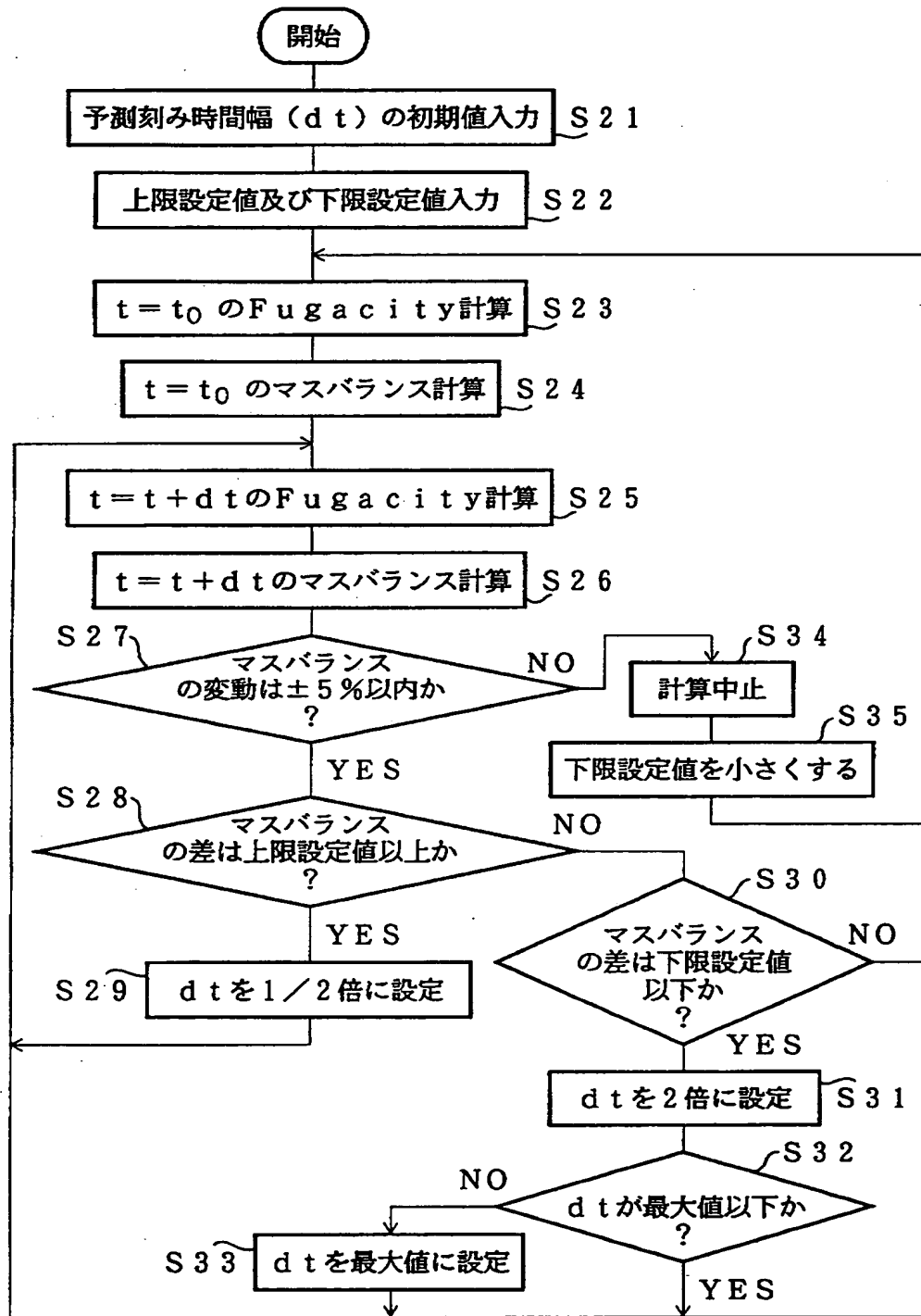


室内空气中浓度 (c)

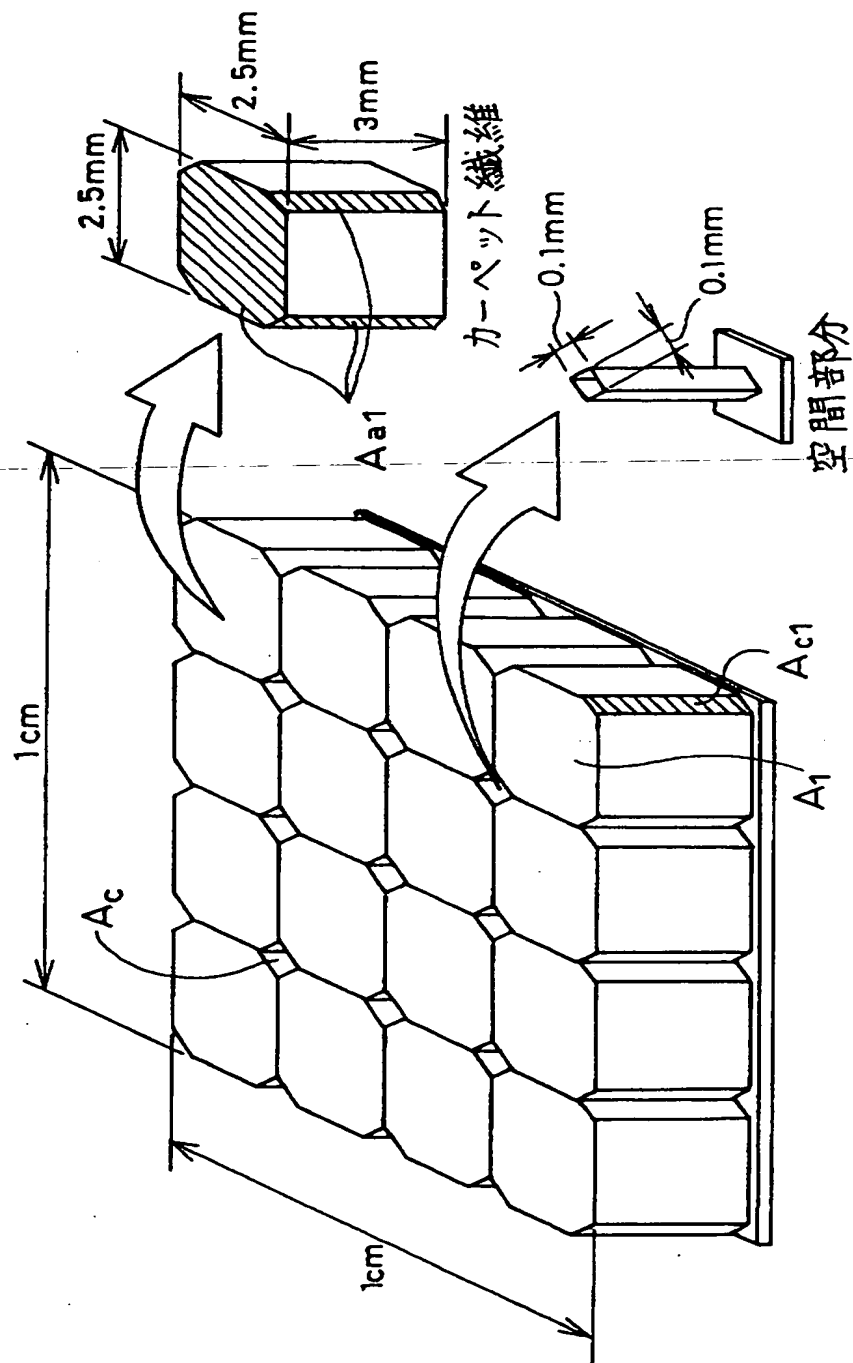
【图4】



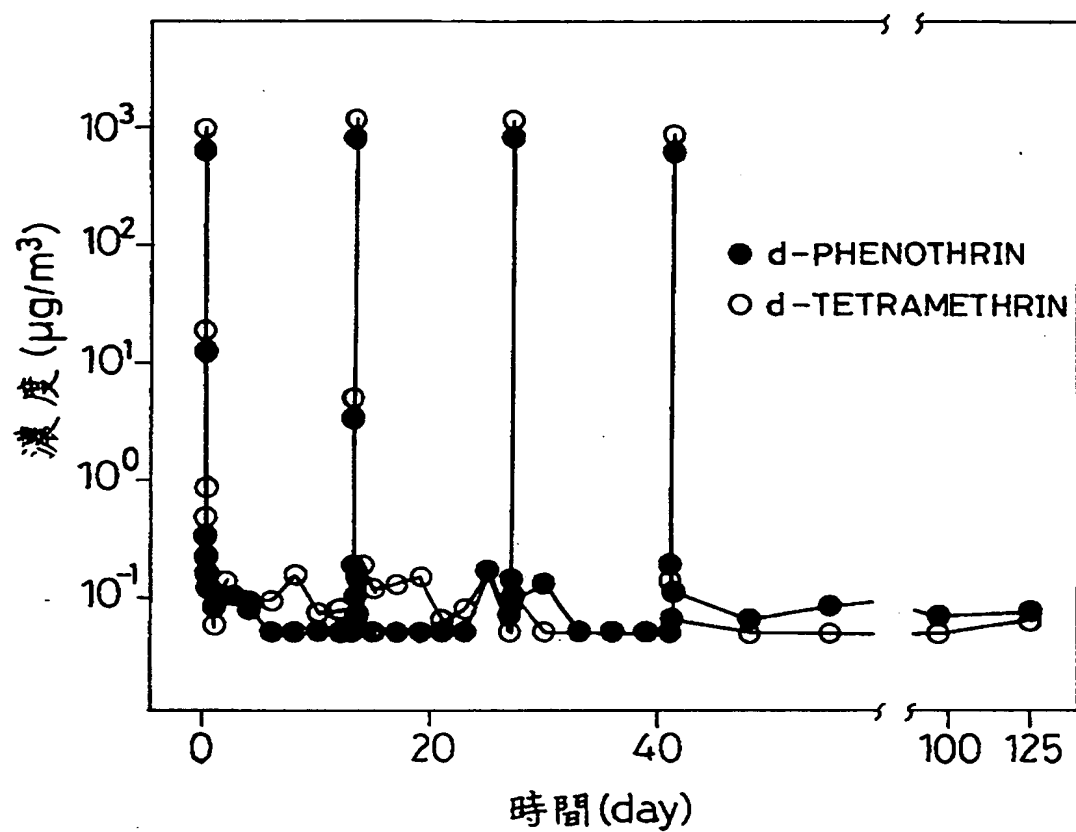
【図5】



【図6】

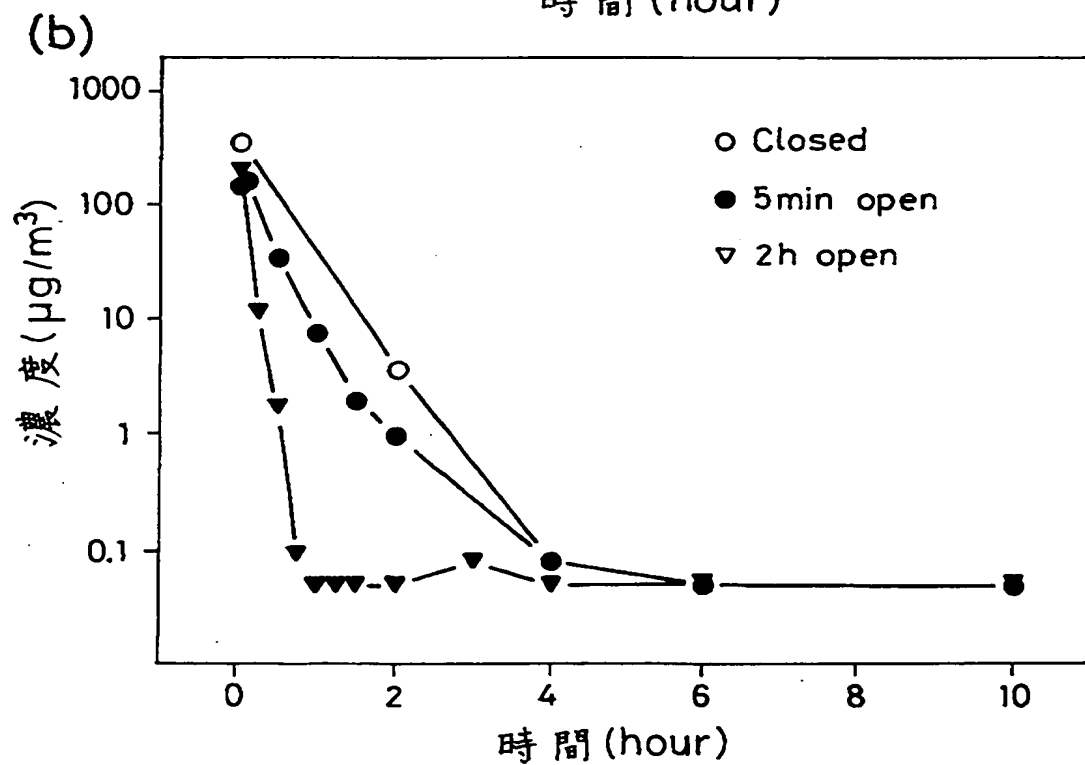
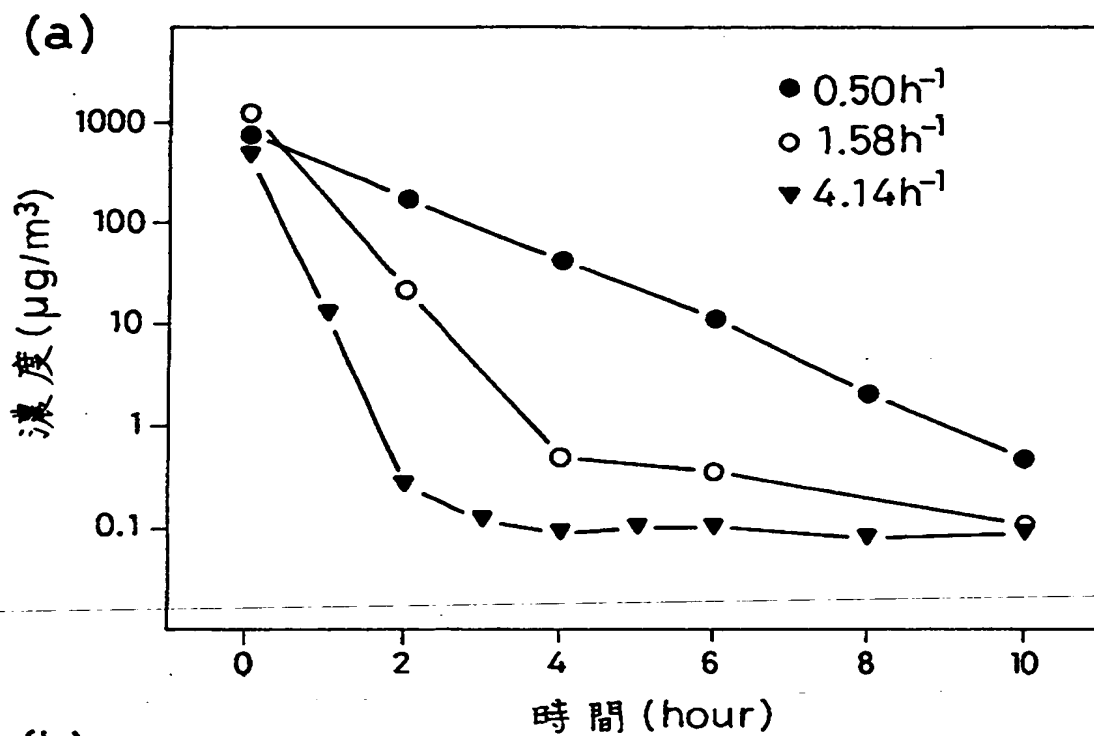


【図7】

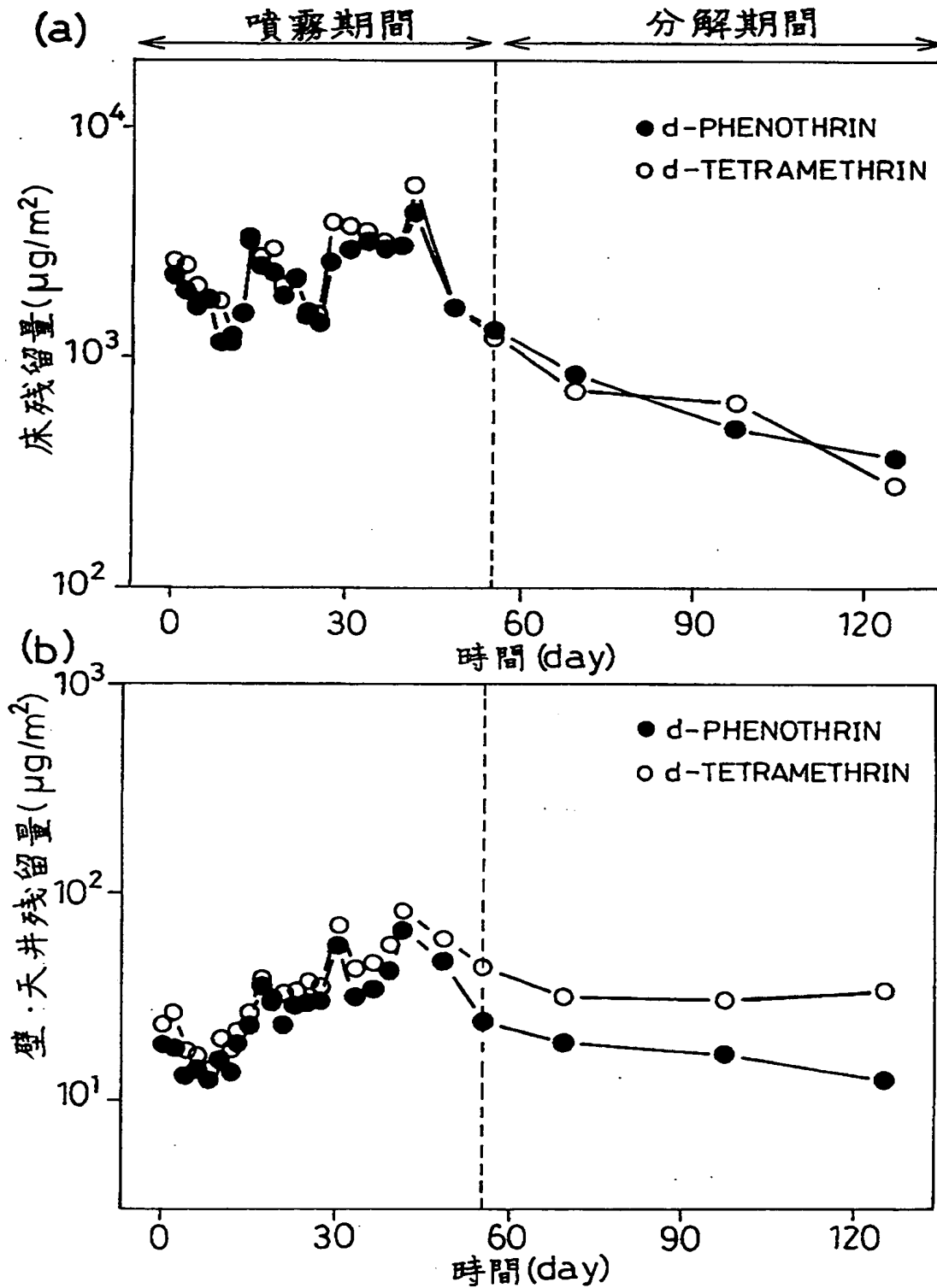




【図 8】

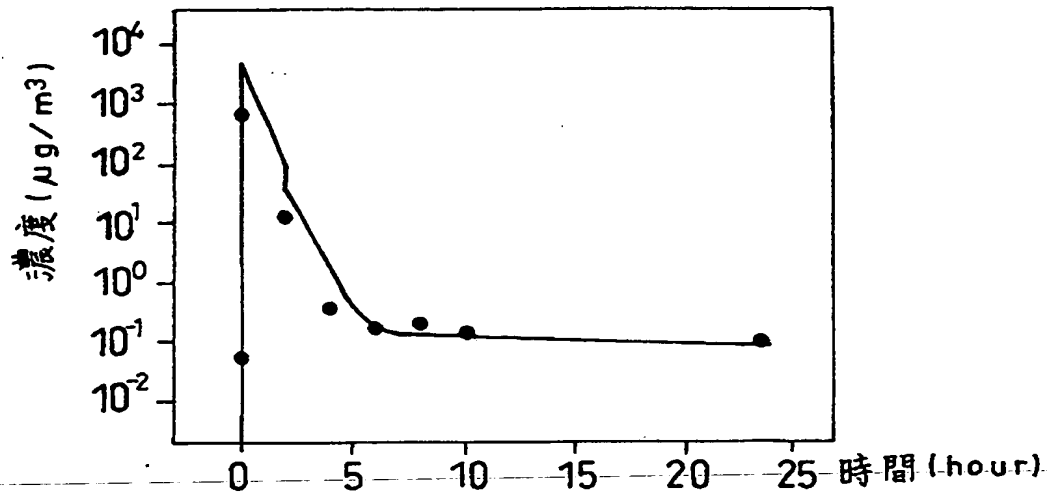


【図9】

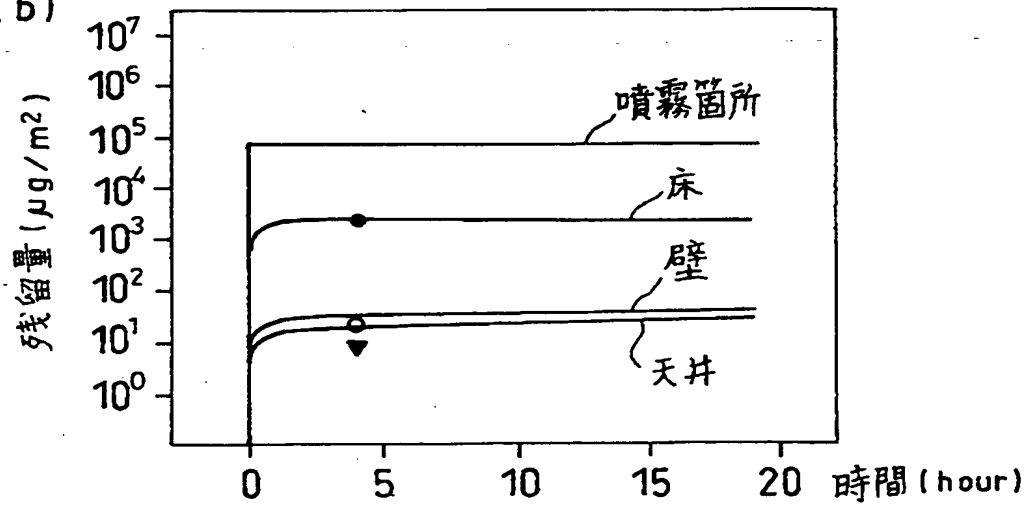


【図10】

(a)



(b)



【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 有害生物防除活性化合物を含む薬剤を室内で残留噴霧したときの化合物の室内挙動を予測すると共に、化合物の人体に対する安全性を評価する。

【解決手段】 有害生物防除活性化合物の性質、室内環境、及び製品の条件等の1次条件を入力し（S1）、それらに基づいて噴霧箇所、2種の浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井におけるFugacityに関する微分方程式を連立して解き、各Fugacityを計算する（S3）。Fugacityに基づいて、室内空気中濃度や噴霧箇所・床の残留量を算出し、上記化合物の室内挙動を予測する（S4）。その後、室内空気中濃度及び残留量を用いて、吸入、経皮、あるいは経口における安全性を評価し（S8・S12・S15）、総合的に安全かどうかの評価を行う（S17）。

【選択図】 図1

【書類名】 職権訂正データ  
【訂正書類】 特許願

<認定情報・付加情報>

【特許出願人】  
【識別番号】 000002093  
【住所又は居所】 大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号  
【氏名又は名称】 住友化学工業株式会社  
【代理人】 申請人  
【識別番号】 100080034  
【住所又は居所】 大阪府大阪市北区天神橋2丁目北2番6号 大和南  
森町ビル 原謙三国際特許事務所  
【氏名又は名称】 原 謙三

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [000002093]

1. 変更年月日	1990年 8月28日
[変更理由]	新規登録
住 所	大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号
氏 名	住友化学工業株式会社